

# Mécanique quantique avancée II: Introduction à l'intégrale de chemin

F. Mila

Cours de huitième semestre

Eté 2004



# Table des matières

<b>1</b>	<b>L'intégrale de chemin en mécanique quantique</b>	<b>1</b>
1.1	Introduction . . . . .	1
1.1.1	La théorie des quanta (Bohr-Sommerfeld, 1915) . . . . .	1
1.1.2	La théorie des matrices (Heisenberg, 1926) . . . . .	2
1.1.3	La mécanique ondulatoire (Schrödinger, 1927) . . . . .	3
1.2	L'intégrale de chemin (Feynman, 1948) . . . . .	4
1.3	Oscillateur harmonique . . . . .	12
1.4	Approximation semi-classique . . . . .	20
<b>2</b>	<b>Action euclidienne et temps imaginaire</b>	<b>25</b>
2.1	Définition . . . . .	25
2.2	Mécanique statistique quantique . . . . .	27
2.3	Mouvement brownien . . . . .	31
2.4	L'effet tunnel . . . . .	33
<b>3</b>	<b>Transitions de phase et intégrale de chemin</b>	<b>37</b>
3.1	Modèle d'Ising: Introduction et généralités . . . . .	37
3.2	Champ moyen . . . . .	39
3.3	Modèle d'Ising et intégrale de chemin . . . . .	45

3.4	Modèle de Landau-Ginsburg . . . . .	51
<b>4</b>	<b>Intégrale de chemin et problème à <math>N</math>-corps</b>	<b>59</b>
4.1	Introduction . . . . .	59
4.2	Etats cohérents : bosons . . . . .	60
4.3	Intégrale de chemin et théorie de perturbations . . . . .	67
4.4	Intégrale de chemin et fermions . . . . .	69
<b>5</b>	<b>Intégrale de chemin et théorie quantique des champs</b>	<b>77</b>
5.1	Champ de Klein-Gordon . . . . .	78
5.2	Limite non relativiste . . . . .	81
5.3	Intégrale de chemin et théories de jauge . . . . .	82
<b>6</b>	<b>Appendices mathématiques</b>	<b>85</b>
A	Intégrales gaussiennes . . . . .	85
B	Intégrales gaussiennes et variables complexes . . . . .	87
C	Approximation de la phase stationnaire . . . . .	89
D	Eléments de calcul fonctionnel . . . . .	90
D.1	Propriétés . . . . .	92
D.2	Dérivées d'ordre supérieur . . . . .	93
D.3	Développement de Taylor . . . . .	93
E	Transformée de Fourier . . . . .	94

## L'intégrale de chemin :

L'intégrale de chemin est une méthode générale qui permet d'exprimer les probabilités de transition en mécanique quantique, et plus généralement les fonctions de corrélation en mécanique statistique et les propagateurs en théorie quantique des champs, à l'aide d'une somme sur les chemins possibles du système. Suivant le point de vue que l'on adopte, on peut y voir :

- Une nouvelle formulation de la mécanique quantique, qui éclaire le rapport avec la mécanique classique et qui s'est révélée un outil très utile, voire indispensable, en théorie quantique des champs, notamment pour les théories de jauge.
- Une méthode qui permet de formuler différents types de champ moyen, et qui fournit une approche systématique pour les développements perturbatifs.
- Un concept unificateur qui rend manifeste l'analogie très étroite entre les phénomènes critiques et la théorie quantique des champs.

L'objet de ce cours est de proposer une introduction à ces différentes applications de l'intégrale de chemin.

## Bibliographie

Titre: L'intégrale fonctionnelle en physique quantique et statistique

Auteur: Philippe Martin

Editeur: Presses polytechniques et universitaires romandes.

Commentaires: Introduction claire et concise. N'aborde pas le problème à N-corps et la théorie quantique des champs.

Titre: Techniques and Applications of Path Integration

Auteur: L. S. Schulman

Editeur: Wiley and sons, New York (1981)

Commentaires: L'un des grands classiques. Orientation plutôt mathématique. Commentaires systématiques sur la rigueur - ou l'absence de rigueur! - des développements.

Titre: Quantum Mechanics and Path Integrals  
Auteur: R. P. Feynman and A. R. Hibbs  
Editeur: McGraw Hill (1965)  
Commentaires: Un autre classique. Expose surtout ce que Feynman a fait lui-même.

Titre: Field Theory: A Path Integral Approach  
Auteur: Ashok Das  
Editeur: World Scientific (1993)  
Commentaires: Une bonne introduction aux applications à la théorie des champs.

Titre: Quantum Many-Particle Systems  
Auteur: John Negele and Henri Orland  
Editeur: Perseus Books (1988).  
Commentaires: La référence pour les applications au problème à N-corps.

Titre: Des phénomènes critiques aux champs de jauge.  
Auteur: Michel Le Bellac  
Editeur: Editions du Cnrs (1988)  
Commentaires: Une très bonne introduction à la théorie des champs basée sur une utilisation quasi-systématique de l'intégrale de chemin en insistant sur le parallèle entre les phénomènes critiques et la physique des particules.

Titre: Quantum Field Theory and Critical Phenomena  
Auteur: J. Zinn-Justin  
Editeur: Oxford University Press (1989).  
Commentaires: Même orientation que le livre de Le Bellac, mais ouvrage exhaustif et de référence.

# Chapitre 1

## L'intégrale de chemin en mécanique quantique

### 1.1 Introduction

En 1948, Richard Feynman a initié une véritable révolution – même si elle n'a pas été soudaine et est encore en marche – en proposant une nouvelle formulation de la mécanique quantique. L'idée de départ, due à Dirac, est la recherche d'une formulation de la mécanique quantique directement en termes du lagrangien. La formulation hamiltonienne n'est en effet pas complètement satisfaisante pour au moins deux raisons :

- Elle suppose l'existence d'un moment conjugué  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$  pour chaque variable, ce qui n'est pas le cas le plus général (*cf* les difficultés de cette méthode pour le champ électromagnétique).
- Elle n'est pas manifestement covariante par une transformation de Lorentz.

Pour mieux comprendre les motivations de Dirac et Feynman, il est utile de faire un bref rappel des différentes formulations de la mécanique quantique.

#### 1.1.1 La théorie des quanta (Bohr-Sommerfeld, 1915)

La première théorie de la quantification des niveaux d'énergie dans les atomes due à Bohr et Sommerfeld (1915) est basée de façon tout à fait essentielle sur la formulation hamiltonienne de la mécanique classique. Les étapes sont les suivantes:

- Déterminer le lagrangien  $L(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N)$  (supposé indépendant du temps).
- En déduire le hamiltonien par une transformation de Legendre:

$$H(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_N) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N), \quad (1.1)$$

où les  $\dot{q}_i$  sont des fonctions de  $(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_N)$  données par  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ .

- Résoudre l'équation de Hamilton-Jacobi

$$H\left(q_1, \dots, q_N, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_N}\right) = E, \quad (1.2)$$

et en déduire une *transformation canonique* vers les variables *action-angle*  $I_i, \omega_i$ , telles que:

$$\begin{cases} \frac{dI_i}{dt} = 0 \\ \frac{dw_i}{dt} = \omega_i. \end{cases} \quad (1.3)$$

Les règles de quantification sont alors données par:  $I_i = \hbar n_i, n_i = 0, 1, \dots$ . Pour un système à un degré de liberté, cela s'écrit:

$$I \equiv \frac{1}{2\pi} \oint p dq = n\hbar, \quad (1.4)$$

où  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  ( $h$  = constante de Planck) = quantum d'action.

Cette théorie, considérée par Sommerfeld comme “la voie royale vers la quantification”, s'est en fait rapidement révélée insuffisante. Sa limitation majeure est de reposer sur une solution complète de l'équation de Hamilton-Jacobi. Cela suppose que le système est *séparable*. Or les systèmes séparables constituent l'exception: l'immense majorité des systèmes mécaniques ne sont pas séparables, et il s'est avéré impossible de généraliser cette formulation sans introduire de nouveaux concepts.

### 1.1.2 La théorie des matrices (Heisenberg, 1926)

En 1926, Heisenberg a démontré que les mêmes règles de quantification pouvaient être obtenues pour un système séparable si les énergies étaient définies comme les valeurs propres de l'opérateur hamiltonien  $H$ :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (1 \text{ particule}), \quad (1.5)$$



où  $x$  et  $p$  doivent être considérés comme des opérateurs satisfaisant les règles de commutation

$$[x, p] = i\hbar \quad (1.6)$$

Mais cette formulation, qui peut être étendue automatiquement à n'importe quel système comportant plusieurs particules en introduisant le hamiltonien

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(x_1, \dots, x_N) \quad (1.7)$$

et les règles de commutation

$$\begin{aligned} [x_i, x_j] &= 0 \\ [p_i, p_j] &= 0 \\ [x_i, p_j] &= i\hbar \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (1.8)$$

ne nécessite pas que le système soit intégrable.

Heisenberg l'a donc proposée comme une théorie générale de la quantification. C'est effectivement la première théorie de la mécanique quantique. L'idée d'introduire des opérateurs qui ne commutent pas était basée sur les propriétés des matrices, et Heisenberg a utilisé cette représentation pour déterminer les valeurs propres du hamiltonien.

Cette façon de quantifier le mouvement, connue sous le nom de "quantification canonique", repose toujours de façon essentielle sur la formulation hamiltonienne du problème de mécanique classique correspondant. En particulier, l'évolution temporelle des opérateurs est régie par l'équation

$$i\hbar \frac{d\hat{O}}{dt} = [\hat{O}, H]. \quad (1.9)$$

### 1.1.3 La mécanique ondulatoire (Schrödinger, 1927)

Indépendamment de Heisenberg, et en se basant sur les propriétés d'onde des électrons révélées dans les expériences de diffraction, Schrödinger a formulé une autre approche basée sur le concept de fonction d'onde. Dans cette approche, l'état d'un système est repéré par une fonction d'onde dont l'évolution temporelle est régie par l'équation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) \quad (1.10)$$

(pour 1 particule non relativiste).

Les niveaux d'énergie d'un atome correspondent aux états stationnaires

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = E \Psi(x, t). \quad (1.11)$$

Dans cette formulation, le hamiltonien n'apparaît pas explicitement. Cependant il est possible de faire le lien avec la formulation de Heisenberg en remarquant que l'équation peut se récrire

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (1.12)$$

avec  $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$  et  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ .

En effet, les opérateurs  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  définis par

$$\begin{aligned} \hat{x} &: \phi \mapsto x\phi \\ \hat{p} &: \phi \mapsto -i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x} \end{aligned}$$

satisfont  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ .

*Démonstration:*

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] \phi &= x(-i\hbar) \frac{\partial \phi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\phi) \\ &= x(-i\hbar) \frac{\partial \phi}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \phi}{\partial x} + i\hbar \phi \\ &= i\hbar \phi. \end{aligned}$$

Le lien entre les deux représentations en termes de bases de l'espace de Hilbert a été établi par Dirac.

## 1.2 L'intégrale de chemin (Feynman, 1948)

L'évolution temporelle de la fonction d'onde peut se décrire à l'aide de l'opérateur d'évolution:

$$\psi(t) = U(t, t_0)\psi(t_0) \quad (1.13)$$

où  $U(t, t_0)$  est un opérateur qui satisfait l'équation

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = HU. \quad (1.14)$$

L'opérateur d'évolution peut être aussi défini par ses éléments de matrice dans une base de l'espace de Hilbert des fonctions d'onde. Deux bases sont particulièrement utiles:  $|x\rangle$  et  $|p\rangle$ .

$|p\rangle$  Les kets  $|p\rangle$  sont définis comme les vecteurs propres de l'opérateur  $\hat{p}$  de valeurs propres  $p$ . Or,  $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ . La fonction d'onde  $\phi_p(x)$  associée à  $p$  satisfait donc:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi_p = p \phi_p. \quad (1.15)$$

Cette équation est manifestement satisfaite par  $e^{ipx/\hbar}$ . La seule subtilité réside dans la normalisation. Comme  $e^{ipx/\hbar}$  n'est pas de carré sommable, on ne peut pas la normaliser à 1. La convention de normalisation est fixée par la relation de fermeture:

$$\int dp |p\rangle \langle p| = \mathbb{1}. \quad (1.16)$$

Posons

$$|p\rangle = \left| \frac{1}{N} e^{ipx/\hbar} \right\rangle \quad (1.17)$$

$$\begin{aligned} \int dp |p\rangle \langle p| \phi(x) &= \frac{1}{N^2} \int dp \int dx' e^{ipx/\hbar} e^{-ipx'/\hbar} \phi(x'), \\ &= \frac{1}{N^2} \int dp e^{ipx/\hbar} \int dx' e^{-ipx'/\hbar} \phi(x'). \end{aligned} \quad (1.18)$$

Or, la transformée de Fourier de  $\phi(x)$  est définie par

$$\tilde{\phi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ikx} \phi(x), \quad (1.19)$$

et la transformation inverse est donnée par:

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \tilde{\phi}(k). \quad (1.20)$$

$$\begin{aligned} \int dp |p\rangle \langle p| \phi(x) &= \frac{1}{N^2} \int dp e^{ipx/\hbar} \sqrt{2\pi} \tilde{\phi}\left(\frac{p}{\hbar}\right) \quad \left(k = \frac{p}{\hbar}\right) \\ &= \frac{\hbar \sqrt{2\pi}}{N^2} \int dk e^{ikx} \tilde{\phi}(k) = \frac{\hbar 2\pi}{N^2} \phi(x) \end{aligned} \quad (1.21)$$

$$\Rightarrow N = \sqrt{2\pi\hbar}. \quad (1.22)$$

$|x\rangle$  Les kets  $|x\rangle$  sont les vecteurs propres de  $\hat{x}$ . Or, par définition de l'opérateur  $\hat{x}$ , on a:

$$\hat{x} \phi(x) = x \phi(x). \quad (1.23)$$

Une fonction propre  $\phi_{x_0}$  de l'opérateur  $\hat{x}$  de valeur propre  $x_0$  satisfait par ailleurs:

$$\hat{x} \phi_{x_0}(x) = x_0 \phi_{x_0}(x). \quad (1.24)$$

$\phi_{x_0}$  doit donc satisfaire l'équation:

$$x\phi_{x_0}(x) = x_0\phi_{x_0}(x) \quad \text{pour tout } x. \quad (1.25)$$

On en déduit que  $\phi_{x_0}(x) = 0$  si  $x \neq x_0$  et que  $\phi_{x_0}(x_0)$  peut prendre n'importe quelle valeur. Mais pour que cette fonction n'ait pas une intégrale nulle, il faut qu'elle soit proportionnelle à la "fonction  $\delta$ " de Dirac  $\delta(x - x_0)$  définie par:

$$\int \delta(x - x_0)f(x)dx = f(x_0) \quad \text{pour toute fonction } f. \quad (1.26)$$

Pour la normalisation, on va encore imposer une relation de fermeture. Or, le choix

$$|x_0\rangle = |\delta(x - x_0)\rangle \quad (1.27)$$

conduit à la relation de fermeture

$$\int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}. \quad (1.28)$$

En effet,  $\langle \phi|x\rangle = \phi^*(x)$  et  $\langle x|\phi\rangle = \phi(x)$ . Ainsi,

$$\begin{aligned} \langle \phi|x\rangle \langle x|\phi'\rangle &= \phi^*(x)\phi'(x) \\ \Rightarrow \int dx \langle \phi|x\rangle \langle x|\phi'\rangle &= \int dx \phi^*(x)\phi'(x) = \langle \phi|\phi'\rangle. \end{aligned}$$

C.Q.F.D.

Par ailleurs, la transformée de Fourier de la fonction  $\delta(x - x_0)$  est une onde plane:

$$\int \delta(x - x_0) e^{-ipx/\hbar} dx = e^{-ipx_0/\hbar}$$

La transformation inverse conduit à la relation suivante:

$$\int e^{ipx/\hbar} e^{-ipx_0/\hbar} dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \delta(x - x_0).$$

Le *propagateur* (ou fonction de Green) est défini par

$$G(x, t; x_0, t_0) = \langle x|U(t, t_0)|x_0\rangle. \quad (1.29)$$

Si l'on connaît le propagateur pour tout  $x$  et tout  $x_0$ , on connaît l'opérateur d'évolution, i.e. la solution de l'équation de Schrödinger.

L'objectif de Feynman était de relier le propagateur au lagrangien du système classique correspondant. Or, la solution de l'équation de mouvement pour l'opérateur d'évolution s'écrit:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i(t-t_0)}{\hbar}H}, \quad (1.30)$$

une expression qui fait intervenir le hamiltonien et non pas le lagrangien.

L'idée de base vient de la remarque suivante: l'hamiltonien  $H$  est la somme de deux termes  $H = T + V$ .

- $V(\hat{x})$  a pour états propres  $|x\rangle$  :  $V(\hat{x})|x\rangle = V(x)|x\rangle$
- $T = \frac{\hat{p}^2}{2m}$  a pour états propres  $|p\rangle$  :  $T|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle$ .

Du coup, une valeur moyenne du type  $\langle x|e^{-\lambda T}e^{-\lambda V}|x_0\rangle$  est facile à calculer. Il suffit d'insérer la relation de fermeture  $\mathbb{1} = \int dp |p\rangle \langle p|$  (on a posé  $\lambda = \frac{i(t-t_0)}{\hbar}$ ).

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \langle x|e^{-\lambda T}e^{-\lambda V}|x_0\rangle &= \int dp \langle x|e^{-\lambda T}|p\rangle \langle p|e^{-\lambda V}|x_0\rangle \\ &= \int dp \langle x|p\rangle e^{-\lambda \frac{p^2}{2m}} \langle p|x_0\rangle e^{-\lambda V(x_0)}. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Malheureusement, comme  $T$  et  $V$  ne commutent pas,

$$e^{-\lambda(T+V)} \neq e^{-\lambda T}e^{-\lambda V}. \quad (1.32)$$

Comment faire?

L'idée de Feynman consiste à utiliser ce qu'on appelle la *formule de Trotter* qui stipule que

$$\langle x|e^{-\lambda(T+V)}|x_0\rangle = \lim_{N \rightarrow +\infty} \langle x|e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N} \dots e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N}|x_0\rangle. \quad (1.33)$$

La démonstration procède en 3 étapes:

- $e^{-\lambda(T+V)} = (e^{-\lambda(T+V)/N})^N$  (évident)
- $e^{-\lambda(T+V)/N} = e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right)$ .

$$\begin{aligned} \text{En effet,} \quad e^{\epsilon(A+B)} &= \mathbb{1} + \epsilon(A+B) + \frac{\epsilon^2}{2}(A+B)^2 + \dots \\ \text{et} \quad e^{\epsilon A}e^{\epsilon B} &= \left(\mathbb{1} + \epsilon A + \frac{\epsilon^2}{2}A^2 + \dots\right) \left(\mathbb{1} + \epsilon B + \frac{\epsilon^2}{2}B^2 + \dots\right) \\ &= \mathbb{1} + \epsilon A + \epsilon B + O(\epsilon^2) \\ \Rightarrow \quad e^{\epsilon(A+B)} &= e^{\epsilon A}e^{\epsilon B} + O(\epsilon^2). \end{aligned}$$

- $\left[(e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N})^N - (e^{-\lambda(T+V)/N})^N\right] = O\left(\frac{1}{N}\right)$ .

Pour cela, on remarque d'abord que l'identité

$$x^N - y^N = (x - y) (x^{N-1} + x^{N-2}y + \dots + y^{N-1})$$

pour  $x, y \in \mathbb{R}$  doit être réarrangée pour deux opérateurs qui ne commutent pas:

$$x^N - y^N = x^{N-1}(x - y) + x^{N-2}(x - y)y + \dots + (x - y)y^{N-1}.$$

Dans le membre de droite de cette égalité, tous les termes sont de la forme  $x^p y^q$ , et ils s'annulent 2 à 2, comme dans l'identité habituelle, sauf  $x^N$  et  $y^N$ .

Ainsi,  $(e^{-\lambda T/N} e^{-\lambda V/N})^N - (e^{-\lambda(T+V)/N})^N$  est la somme de  $N$  termes qui contiennent tous  $e^{-\lambda T/N} e^{-\lambda V/N} - e^{-\lambda(T+V)/N}$ . Comme ce facteur est  $O(1/N^2)$ , la somme est d'ordre  $1/N$ . C.Q.F.D.

Revenons à l'expression du propagateur:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \langle x | e^{-\lambda T/N} e^{-\lambda V/N} \dots e^{-\lambda T/N} e^{-\lambda V/N} | x_0 \rangle$$

et insérons des relations de fermeture du type  $\int dp |p\rangle \langle p|$  entre  $e^{-\lambda T/N}$  et  $e^{-\lambda V/N}$ , et du type  $\int dx |x\rangle \langle x|$  entre  $e^{-\lambda V/N}$  et  $e^{-\lambda T/N}$ . Il vient:

$$\begin{aligned} G(x, t; x_0, t_0) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \int dp_N e^{-\frac{\lambda p_N^2}{2mN}} \langle x | p_N \rangle \int dx_{N-1} e^{-\lambda V(x_{N-1})/N} \langle p_N | x_{N-1} \rangle \\ &\times \int dp_{N-1} e^{-\frac{\lambda p_{N-1}^2}{2mN}} \langle x_{N-1} | p_{N-1} \rangle \int dx_{N-2} e^{-\lambda V(x_{N-2})/N} \langle p_{N-1} | x_{N-2} \rangle \\ &\times \dots \\ &\times \int dp_1 e^{-\frac{\lambda p_1^2}{2mN}} \langle x_1 | p_1 \rangle e^{-\lambda V(x_0)/N} \langle p_1 | x_0 \rangle \end{aligned} \quad (1.34)$$

L'expression devient donc l'intégrale du produit de facteurs de la forme

$$\int dp \langle x | e^{-\lambda T/N} | p \rangle \langle p | e^{-\lambda V/N} | y \rangle = \int dp e^{-\frac{\lambda p^2}{2mN}} \langle x | p \rangle e^{-\lambda V(y)/N} \langle p | y \rangle. \quad (1.35)$$

Mais  $\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ . L'intégrale devient:

$$\frac{e^{-\lambda V(y)/N}}{2\pi\hbar} \int dp e^{-\frac{\lambda p^2}{2mN}} e^{\frac{i}{\hbar} p(x-y)}. \quad (1.36)$$

C'est une intégrale gaussienne (voir Appendice A).

$$\begin{aligned}
\text{Or,} \quad z(j) &= \int dx e^{-\frac{1}{2}Ax^2+jx} = \sqrt{\frac{2\pi}{A}} e^{\frac{j^2}{2A}} \\
A &\Leftrightarrow \frac{\lambda}{mN}, \quad j \Leftrightarrow \frac{i}{\hbar}(x-y) \\
\Rightarrow \frac{e^{-\lambda V(y)/N}}{2\pi\hbar} \int dp e^{-\frac{\lambda p^2}{2mN}} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-y)} &= \frac{e^{-\lambda V(y)/N}}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi mN}{\lambda}} e^{-\frac{(x-y)^2 mN}{2\hbar^2 \lambda}}
\end{aligned}$$

Cette expression reste valable si  $\lambda$  est imaginaire pur à condition d'interpréter  $\sqrt{i}$  comme  $\exp(i\pi/4)$ . On en déduit l'expression suivante pour  $G$ :

$$\begin{aligned}
G(x, t; x_0, t_0) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left( \frac{mN}{2\pi\lambda\hbar^2} \right)^{N/2} \\
&\times \prod_{j=0}^{N-1} \exp \left[ -\frac{m(x_{j+1} - x_j)^2 N}{2\lambda\hbar^2} - \frac{\lambda V(x_j)}{N} \right], \quad \text{avec } x_N \equiv x.
\end{aligned} \tag{1.37}$$

Posons  $\epsilon = \frac{(t - t_0)}{N} = \frac{\hbar\lambda}{iN} \Rightarrow \lambda = \frac{iN\epsilon}{\hbar}$ . On a:

$$\begin{aligned}
-\frac{N}{\lambda\hbar^2} &= -\frac{N\hbar}{\hbar^2 iN\epsilon} = \frac{i}{\hbar\epsilon} \\
-\frac{\lambda}{N} &= -\frac{i\epsilon}{\hbar}.
\end{aligned} \tag{1.38}$$

Le propagateur peut donc être réécrit:

$$\begin{aligned}
G(x, t; x_0, t_0) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left( \frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{N/2} \\
&\times \exp \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 - V(x_j) \right].
\end{aligned} \tag{1.39}$$

L'expression  $\epsilon \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 - V(x_j) \right]$  rappelle une somme de Riemann. En effet,  $\epsilon = \frac{(t - t_0)}{N}$ . Considérons une fonction dérivable  $x(s)$  définie entre  $t_0$  et  $t$ , et exprimons l'intégrale

$$\int_{t_0}^t ds \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{ds} \right)^2 - V(x(s)) \right]$$

sous forme d'une somme de Riemann:

$$\int_{t_0}^t ds \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{t - t_0}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{m}{2} \dot{x}_j^2 - V(x_j). \tag{1.40}$$

Mais  $\dot{x}_j \approx \frac{x_{j+1} - x_j}{(t - t_0)/N}$ ,

$$\Rightarrow \int_{t_0}^t ds \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left( \frac{t - t_0}{N} \right) \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{(t - t_0)/N} \right)^2 - V(x_j) \right]. \quad (1.41)$$

Or,  $\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x)$  n'est rien d'autre que le lagrangien, et  $\int_{t_0}^t ds L(x, \dot{x}, s)$  est l'action le long de la trajectoire  $x(s)$ . Ceci suggère d'écrire le propagateur sous la forme:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[x]}$$

où le symbole  $\int \mathcal{D}x$  désigne la somme sur tous les chemins possibles, modulo une mesure qui reste à définir. Le propagateur apparaît donc comme la somme de  $\exp(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[x])$  sur tous les chemins possibles du système (voir Figure 1). Cet objet s'appelle une *intégrale de chemin* ou *intégrale fonctionnelle*. Cette écriture est très suggestive, mais elle est purement formelle, et pour lui donner un sens, autrement dit pour définir la mesure  $\int \mathcal{D}x$ , il faut impérativement revenir à la forme explicite. C'est d'autant plus vrai que le chemin typique n'est pas différentiable: comme  $x_j$  et  $x_{j+1}$  prennent toutes les valeurs entre  $-\infty$  et  $+\infty$ ,  $\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon}$  ne tend pas vers une constante mais diverge quand  $N \rightarrow +\infty$  (voir le mouvement brownien).

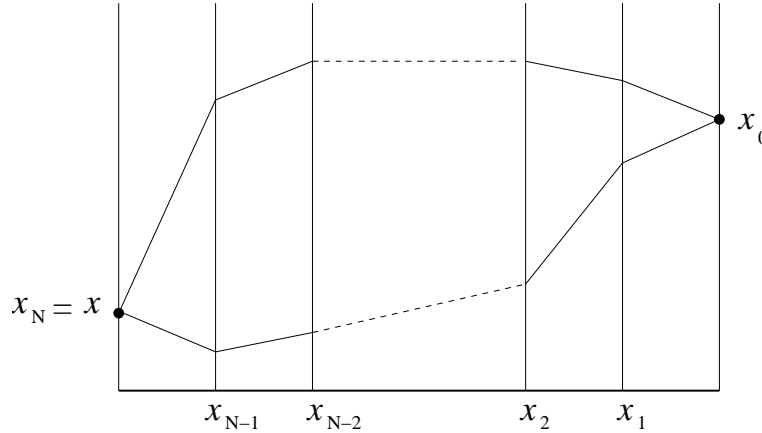


Figure 1: Exemples de trajectoires qui interviennent dans la somme sur les chemins.

Ceci étant dit, cette formulation répond à la question que s'était posée Feynman (et avant lui Dirac) sur la possibilité de formuler la mécanique quantique à l'aide du lagrangien. Avec la définition de l'intégrale fonctionnelle donnée par la correspondance entre les 2 expressions précédentes du propagateur, la mécanique quantique



peut être basée sur cette définition du propagateur. En d'autres termes, on peut faire l'économie de la quantification canonique et prendre cette expression du propagateur pour quantifier le mouvement d'une particule dans un potentiel.

La difficulté essentielle de cette méthode, c'est qu'elle ne fournit pas de façon interne la définition de l'intégrale fonctionnelle. Il faut par exemple rajouter une prescription pour obtenir une expression qui redonne l'équation de Schrödinger en présence d'un champ magnétique. De même, en théorie quantique des champs, le sens qu'il faut donner à l'intégrale se réfère à la quantification canonique.

Notons que la généralisation à  $N$  degrés de liberté est sans problème: les intégrales intermédiaires sont des intégrales de volume à  $N$  dimensions:  $dx_i \rightarrow d^N x_i$ .

*Exemple: Particule libre ( $V = 0$ )*

Dans ce cas, le propagateur se calcule immédiatement:

$$\begin{aligned}
 \langle x | e^{-\lambda T} | x_0 \rangle &= \int dp \langle x | e^{-\lambda T} | p \rangle \langle p | x_0 \rangle \\
 &= \int dp e^{-\frac{\lambda p^2}{2m}} \frac{e^{ipx/\hbar} e^{-ipx_0/\hbar}}{2\pi\hbar} \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{-\frac{\lambda}{2m} p^2} e^{ip(x-x_0)/\hbar} \\
 &\quad \left( A = \frac{\lambda}{m}, \quad j = \frac{i(x-x_0)}{\hbar} \right) \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi m}{\lambda}} \exp \left[ -\frac{(x-x_0)^2 m}{\hbar^2 2\lambda} \right]
 \end{aligned}$$

$$\text{soit } \left\langle x \left| e^{-\frac{i(t-t_0)}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m}} \right| x_0 \right\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t-t_0)}} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar(t-t_0)} (x-x_0)^2 \right].$$

Or, pour une particule libre, l'action se calcule aisément. La trajectoire classique est donnée par:

$$x(\tau) = x_0 + \frac{\tau - t_0}{t - t_0} (x - x_0) \quad (1.42)$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow S_{\text{cl}} &= \int_{t_0}^t d\tau L(x, \dot{x}) = \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} m \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 \\
 &= \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} m \left( \frac{x - x_0}{t - t_0} \right)^2 = \frac{1}{2} m \frac{(x - x_0)^2}{t - t_0} \\
 \Rightarrow G(x, t; x_0, t_0) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t-t_0)}} \exp \left( \frac{iS_{\text{cl}}}{\hbar} \right).
 \end{aligned}$$

### 1.3 Oscillateur harmonique

Considérons le cas où  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ . Le propagateur s'écrit:

$$G(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \int dx_1 \dots dx_N \exp \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^N \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x_j^2 \right] \quad (1.43)$$

avec  $x_{N+1} = x$  et  $\epsilon = \frac{t - t_0}{N+1}$ .

*1<sup>ère</sup> étape:* il faut travailler sur l'exponentielle.

Tout d'abord, il faut isoler les termes qui contiennent  $x_0$  et  $x_{N+1}$  puisqu'on n'intègre pas sur  $x_0$  et  $x_{N+1}$ .

$$\begin{aligned} (x_1 - x_0)^2 &= x_1^2 + x_0^2 - 2x_0x_1 \\ (x_2 - x_1)^2 &= x_2^2 + x_1^2 - 2x_1x_2 \\ &\vdots \\ (x_{N+1} - x_N)^2 &= x_{N+1}^2 + x_N^2 - 2x_Nx_{N+1} \end{aligned}$$

L'argument de l'exponentielle peut donc s'écrire

$$\begin{aligned} \frac{im}{2\hbar\epsilon} (2x_1^2 + \dots + 2x_N^2 - 2x_1x_2 - \dots - 2x_{N-1}x_N) - \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{1}{2} m \omega^2 (x_1^2 + \dots + x_N^2) \\ + \frac{im}{2\hbar\epsilon} (-2x_0x_1) + \frac{im}{2\hbar\epsilon} (-2x_Nx_{N+1}) + \frac{im}{2\hbar\epsilon} (x_0^2 + x_{N+1}^2) - \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 \end{aligned}$$

Cela se met sous la forme

$$\exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^N j_i x_i \right) \exp \frac{im}{2\hbar\epsilon} (x_0^2 + x_{N+1}^2)$$

avec

$$A = \frac{m}{\hbar\epsilon} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ & \ddots & \ddots & & \\ & -1 & & \ddots & \\ & & 0 & & -1 \\ 0 & & & -1 & 2 \end{pmatrix} + \frac{i\epsilon}{\hbar} m \omega^2 \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad j = -\frac{im}{\hbar\epsilon} \begin{pmatrix} x_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ x_{N+1} \end{pmatrix}.$$

où on a laissé tomber le facteur  $\exp \left[ -\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{m\omega^2}{2} x_0^2 \right]$  qui vient du potentiel car il disparaît à la limite  $N \rightarrow +\infty$  ( $\epsilon \rightarrow 0$ ).

Or,

$$\begin{aligned} & \int dx_1 \dots \int dx_N \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^N j_i x_i \right) \\ &= (2\pi)^{N/2} \frac{1}{\sqrt{\det A}} \exp \left( \frac{1}{2} {}^t j A^{-1} j \right) \quad (\text{voir formulaire}). \end{aligned}$$

Comme seuls  $j_1$  et  $j_N$  sont différents de 0, on a

$$\begin{aligned} (A^{-1}j)_i &= (A^{-1})_{i1} j_1 + (A^{-1})_{iN} j_N \\ \Rightarrow {}^t j A^{-1} j &= j_1 (A^{-1})_{11} j_1 + j_N (A^{-1})_{N1} j_1 \\ &\quad + j_1 (A^{-1})_{1N} j_N + j_N (A^{-1})_{NN} j_N. \end{aligned}$$

Posons

$$A_N = \begin{pmatrix} a & b & & & \\ & b & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 0 & \\ & & & & b \\ 0 & & & & & a \end{pmatrix}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_N$

et calculons  $(A^{-1})_{11}, (A^{-1})_{1N}, (A^{-1})_{N1}, (A^{-1})_{NN}$  en fonction de  $\det A_N$ .

De façon générale, on a:

$$(A^{-1})_{ij} = \frac{a^{ji}}{\det A}$$

où  $a^{ij} \equiv \text{cofacteur} = (-1)^{i+j} \det(B_{ij})$ , où  $B_{ij}$  est la matrice qui s'obtient à partir de

$A$  en supprimant la ligne  $i$  et la colonne  $j$ .

$$a^{11} = \det \begin{pmatrix} a & b & & 0 \\ b & & & \\ & & & \\ 0 & & & b \\ & & & a \end{pmatrix} = \det(A_{N-1}) = a^{N-1}$$

$$a^{1N} = (-1)^{N+1} \det \begin{pmatrix} b & a & b & 0 \\ & & & \\ & & & b \\ 0 & & & a \\ & & & b \end{pmatrix} = (-1)^{N+1} b^{N-1} = a^{N1}$$

$$\Rightarrow \boxed{{}^t j A^{-1} j = \frac{1}{\det A_N} (j_1^2 \det(A_{N-1}) + j_N^2 \det(A_{N-1}) + 2j_1 j_N (-1)^{N+1} b^{N-1})}$$

Par ailleurs, on peut aisément calculer  $\det(A_N)$ . En effet, on a

$$\begin{aligned} \det(A_N) &= a \det(A_{N-1}) - b \det \begin{pmatrix} b & b & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a & b & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b & a & b & 0 & \cdots & 0 \\ & & & \ddots & & \\ & & & & & \end{pmatrix} \\ &= a \det(A_{N-1}) - b^2 \det(A_{N-2}). \end{aligned}$$

Posons  $I_N = \det A_N$ . On a donc une récurrence double qu'on peut mettre sous forme matricielle:

$$\begin{pmatrix} I_N \\ I_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & -b^2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{N-1} \\ I_{N-2} \end{pmatrix},$$

soit

$$\begin{pmatrix} I_N \\ I_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & -b^2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^N \begin{pmatrix} I_0 \\ I_{-1} \end{pmatrix}.$$

$I_0$  et  $I_{-1}$  sont fixés par la condition  $I_1 = a$ ,  $I_2 = a^2 - b^2$

$$\Rightarrow \boxed{I_0 = 1, \quad I_{-1} = 0.}$$

Pour calculer  $\begin{pmatrix} a & -b^2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^N \equiv C^N$ , on diagonalise  $C$ :

$$C = S \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} S^{-1}.$$

$\lambda_+$  et  $\lambda_-$  sont solutions de

$$\begin{aligned} \det \begin{pmatrix} a - \lambda & -b^2 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} &= 0 \\ \Rightarrow \lambda^2 - a\lambda + b^2 &= 0 \\ \Rightarrow \lambda_{\pm} &= \frac{a \pm \sqrt{a^2 - 4b^2}}{2}. \end{aligned}$$

La matrice  $S$  peut se mettre sous la forme:

$$\begin{aligned} S &= \begin{pmatrix} \lambda_+ & \lambda_- \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \\ \text{En effet, } \det S &= \lambda_+ - \lambda_- \\ \text{et } S^{-1} &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} 1 & -\lambda_- \\ -1 & \lambda_+ \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} S^{-1} &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+ & -\lambda_+ \lambda_- \\ -\lambda_- & \lambda_+ \lambda_- \end{pmatrix} \\ S \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} S^{-1} &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+^2 - \lambda_-^2 & -\lambda_+^2 \lambda_- + \lambda_+ \lambda_-^2 \\ \lambda_+ - \lambda_- & -\lambda_+ \lambda_- + \lambda_+ \lambda_- \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_+ + \lambda_- & -\lambda_+ \lambda_- \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Mais d'après l'équation satisfaite par  $\lambda_+$  et  $\lambda_-$ , on a:

$$\begin{cases} \lambda_+ + \lambda_- = a \\ \lambda_+ \lambda_- = b^2 \end{cases}$$

C.Q.F.D

On a donc:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} I_N \\ I_{N-1} \end{pmatrix} &= S \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} S^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= S \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{c}{d} \end{pmatrix} \\ &= S \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+^N/c \\ -\lambda_-^N/d \end{pmatrix} = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+^{N+1} - \lambda_-^{N+1} \\ \lambda_+^N - \lambda_-^N \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{I_N = \frac{\lambda_+^{N+1} - \lambda_-^{N+1}}{\lambda_+ - \lambda_-}}.$$

Revenons au propagateur. Il s'écrit:

$$\begin{aligned} & \lim_{N \rightarrow +\infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} (x_0^2 + x_{N+1}^2) \right\} \\ & \times (2\pi)^{N/2} \frac{1}{\sqrt{I_N}} \exp \left\{ \frac{1}{2} \frac{-m^2}{\hbar^2 \epsilon^2} \left[ (x_0^2 + x_{N+1}^2) \frac{I_{N-1}}{I_N} + 2x_0 x_{N+1} (-1)^{N+1} \frac{b^{N-1}}{I_N} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Il faut désormais calculer cette limite. Les données sont:

$$\begin{cases} a = \left( -\frac{2m}{\hbar \epsilon} + \frac{\epsilon}{\hbar} m \omega^2 \right) i \\ b = \frac{m}{\hbar \epsilon} i \end{cases}$$

$$\lambda_{\pm} = \frac{a \pm \sqrt{a^2 - 4b^2}}{2}, \quad \epsilon = \frac{t - t_0}{N + 1} = \frac{T}{N + 1}.$$

1. *Calcul de  $\lambda_+$  et  $\lambda_-$ :*

$$\begin{aligned} a^2 &= - \left[ \frac{4m^2}{\hbar^2 \epsilon^2} + \frac{m^2 \omega^4 \epsilon^2}{\hbar^2} - \frac{4m^2 \omega^2}{\hbar^2} \right] \\ b^2 &= - \frac{m^2}{\hbar^2 \epsilon^2} \\ \Rightarrow \quad a^2 - 4b^2 &= \frac{4m^2 \omega^2}{\hbar^2} - \frac{m^2 \omega^4 \epsilon^2}{\hbar^2} \\ \Rightarrow \quad &\begin{cases} \lambda_+ = \frac{-m}{\hbar \epsilon} i + \frac{m \omega}{\hbar} + O(\epsilon) \\ \lambda_- = \frac{-m}{\hbar \epsilon} i - \frac{m \omega}{\hbar} + O(\epsilon) \end{cases} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\lambda_+ - \lambda_- = \frac{2m \omega}{\hbar} + O(\epsilon)}.$$

2. Calcul de  $\lambda_+^{N+1} - \lambda_-^{N+1}$ :

$$\begin{aligned}
 \lambda_+^{N+1} &\simeq \left(-\frac{m}{\hbar\epsilon}i + \frac{m\omega}{\hbar}\right)^{N+1} = \left(\frac{-mi}{\hbar\epsilon}\right)^{N+1} \left(1 + \frac{m\omega}{\hbar} \frac{\hbar\epsilon}{-mi}\right)^{N+1} \\
 &= \left(\frac{-mi}{\hbar\epsilon}\right)^{N+1} (1 + i\epsilon\omega)^{N+1} \\
 &= \left(\frac{-mi}{\hbar\epsilon}\right)^{N+1} \left(1 + \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} \\
 \lambda_-^{N+1} &= \left(\frac{-mi}{\hbar\epsilon}\right)^{N+1} \left(1 - \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} \\
 \Rightarrow \lambda_+^{N+1} - \lambda_-^{N+1} &= \left(\frac{-mi}{\hbar\epsilon}\right)^{N+1} \left[ \left(1 + \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} - \left(1 - \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} \right].
 \end{aligned}$$

3. Coefficient devant les exponentielles:

$$\begin{aligned}
 &\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} (2\pi)^{\frac{N}{2}} \frac{\sqrt{\lambda_+ - \lambda_-}}{\sqrt{\lambda_+^{N+1} - \lambda_-^{N+1}}} \\
 &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} (2\pi)^{\frac{N}{2}} \frac{(2m\omega)^{\frac{1}{2}}}{\hbar^{\frac{1}{2}}} \\
 &\quad \times \left(\frac{\hbar\epsilon}{-mi}\right)^{\frac{N+1}{2}} \left[ \left(1 + \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} - \left(1 - \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} \right]^{-1/2} \\
 &= (2\pi)^{-\frac{N+1}{2} + \frac{N}{2}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \left(1 + \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} - \left(1 - \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} \right]^{-1/2} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \left(1 + \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} - \left(1 - \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} \right]^{-1/2}.
 \end{aligned}$$

Mais  $\lim_{N \rightarrow +\infty} \left(1 + \frac{x}{N}\right)^N = e^x$ . En effet, posons  $u_N = \left(1 + \frac{x}{N}\right)^N$ ,

$$\ln u_N = N \ln \left(1 + \frac{x}{N}\right) = N \left(\frac{x}{N} - \frac{x^2}{2N^2} + \dots\right) \rightarrow x.$$

Ainsi

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \left[ \left(1 + \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} - \left(1 - \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} \right]^{-1/2} = [2i \sin \omega T]^{-1/2}.$$

Le coefficient devant les exponentielles est donc:  $\left(\frac{m\omega}{2i\pi \hbar \sin \omega T}\right)^{\frac{1}{2}}$ .

4. Coefficient de  $x_0 x_{N+1}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1-m^2}{2\hbar^2\epsilon^2} 2(-1)^{N+1} \frac{b^{N-1}}{I_N} &\simeq \frac{1-m^2}{2\hbar^2\epsilon^2} 2(-1)^{N+1} \left(\frac{m}{\hbar\epsilon}\right)^{N-1} \frac{2m\omega}{\hbar} \left(\frac{\hbar\epsilon}{-mi}\right)^{N+1} \frac{1}{2i\sin\omega T} \\ &= \frac{m\omega}{i\hbar\sin\omega T} = \frac{i}{\hbar} \left(-m\omega \frac{1}{\sin\omega T}\right). \end{aligned}$$

5. Coefficient de  $x_0^2$ :

$$\begin{aligned} \frac{I_{N-1}}{I_N} &= \left(\frac{\hbar\epsilon}{-mi}\right) \frac{\left(1 + \frac{i\omega T}{N+1}\right)^N - \left(1 - \frac{i\omega T}{N+1}\right)^N}{\left(1 + \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1} - \left(1 - \frac{i\omega T}{N+1}\right)^{N+1}} \\ &\simeq \left(\frac{\hbar\epsilon}{-mi}\right) \frac{\sin\omega T \left(1 - \frac{1}{N}\right)}{\sin\omega T} \\ &= \left(\frac{\hbar\epsilon}{-mi}\right) \frac{\sin\omega T \cos(\omega T/N) - \sin(\omega T/N) \cos\omega T}{\sin\omega T} \\ &\simeq \frac{\hbar\epsilon}{-mi} + \frac{\hbar\epsilon}{-mi} \frac{\cos\omega T}{\sin\omega T} \sin(\omega T/N). \end{aligned}$$

Utilisons cette expression pour calculer le coefficient total:  $x_0^2$  est facteur de

$$\begin{aligned} \frac{im}{2\hbar\epsilon} - \frac{1}{2} \frac{m^2}{\hbar^2\epsilon^2} \frac{I_{N-1}}{I_N} &= \frac{im}{2\hbar\epsilon} - \frac{1}{2} \frac{m^2}{\hbar^2\epsilon^2} \left(\frac{\hbar\epsilon}{-mi} + \frac{\hbar\epsilon}{mi} \frac{\cos\omega T}{\sin\omega T} \sin(\omega T/N)\right) \\ &= \frac{im}{2\hbar\epsilon} - \frac{1}{2} \frac{mi}{\hbar\epsilon} + \frac{1}{2} \frac{mi}{\hbar\epsilon} \frac{\cos\omega T}{\sin\omega T} \sin(\omega T/N). \end{aligned}$$

Le dernier terme tend vers

$$\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \frac{\cos\omega T}{\sin\omega T}$$

puisque

$$\frac{1}{\epsilon} \sin(\omega T/N) = \frac{N+1}{T} \sin(\omega T/N) \rightarrow \omega.$$

*Récapitulation:*

$$\boxed{G(x_f, T; x_i, 0) = \left(\frac{m\omega}{2i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2} \exp \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{m\omega}{2\sin\omega T} ((x_i^2 + x_f^2) \cos\omega T - 2x_i x_f) \right]}.$$

*Interprétation:* Afin d'interpréter ce résultat, calculons l'action classique de l'oscillateur harmonique.

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \\ \Rightarrow m\ddot{x} + m\omega^2 x &= 0 \\ \Rightarrow x &= x_1 \cos\omega T + x_2 \sin\omega T \end{aligned}$$



$$\boxed{t=0} \quad x = x_i \Rightarrow x_1 = x_i$$

$$\boxed{t=T} \quad x = x_f \Rightarrow x_2 = \frac{x_f - x_i \cos \omega T}{\sin \omega T}$$

$$\begin{aligned} S &= \int_0^T dt L(x, \dot{x}) = \int_0^T dt \left( \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \\ x^2 &= x_1^2 \cos^2 \omega t + x_2^2 \sin^2 \omega t + 2x_1 x_2 \cos \omega t \sin \omega t \\ &= x_1^2 \frac{\cos 2\omega t + 1}{2} + x_2^2 \frac{1 - \cos 2\omega t}{2} + x_1 x_2 \sin 2\omega t \\ \int_0^T x^2 dt &= x_1^2 \left[ \frac{\sin 2\omega t}{4\omega} + \frac{t}{2} \right]_0^T + x_2^2 \left[ \frac{t}{2} - \frac{\sin 2\omega t}{4\omega} \right]_0^T - x_1 x_2 \left[ \frac{\cos 2\omega t}{2\omega} \right]_0^T \\ &= \frac{x_1^2}{2} \left( \frac{\sin 2\omega T}{2\omega} + T \right) + \frac{x_2^2}{2} \left( T - \frac{\sin 2\omega T}{2\omega} \right) - x_1 x_2 \frac{\cos 2\omega T - 1}{2\omega}. \\ \dot{x} &= -x_1 \omega \sin \omega t + x_2 \omega \cos \omega t \\ \Rightarrow \int_0^T \dot{x}^2 dt &= \frac{x_2^2 \omega^2}{2} \left( \frac{\sin 2\omega T}{2\omega} + T \right) + \frac{x_1^2 \omega^2}{2} \left( T - \frac{\sin 2\omega T}{2\omega} \right) \\ &\quad + x_1 x_2 \omega^2 \frac{\cos 2\omega T - 1}{2\omega}. \end{aligned}$$

Finalement,

$$\begin{aligned} S &= \frac{m}{2} \int_0^T (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt \\ &= \frac{m}{2} \left[ \frac{x_2^2 \omega^2}{2} \frac{\sin 2\omega T}{\omega} - \frac{x_1^2 \omega^2}{2} \frac{\sin 2\omega T}{\omega} + x_1 x_2 \omega^2 \frac{\cos 2\omega T - 1}{\omega} \right] \\ &= \frac{m\omega}{4} [-x_1^2 \sin 2\omega T + x_2^2 \sin 2\omega T - 4x_1 x_2 \sin^2 \omega T]. \end{aligned}$$

Réexprimons le terme entre crochets [...] à l'aide de  $x_i$  et  $x_f$ :

$$\begin{cases} x_2^2 = \frac{x_f^2 + x_i^2 \cos^2 \omega T - 2x_i x_f \cos \omega T}{\sin^2 \omega T} \\ x_1 = x_i \\ x_1 x_2 = \frac{x_i x_f - x_i^2 \cos \omega T}{\sin \omega T} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} [\dots] &= x_i^2 \left[ -2 \sin \omega T \cos \omega T + \frac{2 \sin \omega T \cos \omega T \cos^2 \omega T}{\sin^2 \omega T} \right. \\ &\quad \left. + 4 \sin^2 \omega T \frac{\cos \omega T}{\sin \omega T} \right] + x_f^2 \left[ 2 \frac{\sin \omega T \cos \omega T}{\sin^2 \omega T} \right] \\ &\quad + x_i x_f \left[ -\frac{2 \cos \omega T}{\sin^2 \omega T} 2 \sin \omega T \cos \omega T - 4 \frac{\sin^2 \omega T}{\sin \omega T} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_i^2 : & \quad -2 \sin \omega T \cos \omega T + 2 \frac{\cos^3 \omega T}{\sin \omega T} + 4 \sin \omega T \cos \omega T \\
= & \quad \frac{1}{\sin \omega T} [-2 \cos \omega T \sin^2 \omega T + 2 \cos^3 \omega T + 4 \sin^2 \omega T \cos \omega T] \\
= & \quad \frac{1}{\sin \omega T} [2 \cos \omega T (\sin^2 \omega T + \cos^2 \omega T)] \\
= & \quad 2 \frac{\cos \omega T}{\sin \omega T} \\
x_f^2 : & \quad 2 \frac{\cos \omega T}{\sin \omega T} \\
x_i x_f : & \quad \frac{1}{\sin \omega T} [-4 \cos^2 \omega T - 4 \sin^2 \omega T] \\
= & \quad \frac{-4}{\sin \omega T}
\end{aligned}$$

Finalement, on trouve

$$S_{\text{cl}} = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} [(x_i^2 + x_f^2) \cos \omega T - 2x_i x_f].$$

*Conclusion:*

$$G(x_f, T; x_i, 0) = \left( \frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S_{\text{cl}} \right].$$

Comme dans le cas d'une particule libre, le propagateur est étroitement relié au mouvement classique. La phase est égale à  $i/\hbar$  multiplié par l'action classique.

## 1.4 Approximation semi-classique

Dans le cas d'un potentiel général, on peut faire les deux remarques suivantes:

- L'intégrale fonctionnelle ne peut en général pas être calculée exactement.
- Le résultat obtenu dans le cas de l'oscillateur harmonique suggère que le propagateur peut être approché par

$$G(x, t; x_0, t_0) \simeq \text{cte} \times e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{cl}}}. \quad (1.44)$$

Est-ce effectivement une bonne approximation?

*Réponse:* si le chemin classique existant est un minimum bien défini de l'action classique (voir plus loin pour plus de détails), alors c'est une bonne approximation. C'est en fait le terme dominant dans un développement en puissances de  $\hbar$ .

L'idée de base est de généraliser la méthode de la phase stationnaire à l'intégrale de chemin. En effet, l'action  $S[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt L(x, \dot{x})$  est extrémale pour le chemin classique, et une approximation du type phase stationnaire devrait conduire à une expression contenant  $e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{cl}}}$ .

Considérons donc l'action

$$\begin{aligned}
 S[x] &= \int_{t_i}^{t_f} dt L(x, \dot{x}) \\
 \text{avec } L(x, \dot{x}) &= \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \\
 \bullet \quad \frac{\delta S[x]}{\delta x(t_1)} &= \int_{t_i}^{t_f} dt [m \dot{x} \delta'(t - t_1) - V'(x) \delta(t - t_1)] \\
 \bullet \quad \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t_1) \delta x(t_2)} &= \int_{t_i}^{t_f} dt [m \delta'(t - t_1) \delta'(t - t_2) - V''(x) \delta(t - t_1) \delta(t - t_2)] \\
 \Rightarrow S[x + \eta] &= S[x] + \int_{t_i}^{t_f} dt_1 \frac{\delta S[x]}{\delta x(t_1)} \eta(t_1) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \int dt_1 \int dt_2 \eta(t_1) \eta(t_2) \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t_1) \delta x(t_2)} + \dots
 \end{aligned}$$

La trajectoire classique satisfait

$$\left. \frac{\delta S[x]}{\delta x(t_1)} \right|_{x=x_{\text{cl}}} = 0 \quad (\forall t_1). \quad (1.45)$$

En effet,  $\frac{\delta S[x]}{\delta x(t_1)}$  peut être explicité en

$$\frac{\delta S[x]}{\delta x(t_1)} = -m \ddot{x}(t_1) - V'(x(t_1)), \quad (1.46)$$

et d'après l'équation d'Euler-Lagrange, le membre de droite est nul.

$$\Rightarrow S[x_{\text{cl}} + \eta] = S[x_{\text{cl}}] + \frac{1}{2} \int dt \int dt_1 \int dt_2 \eta(t_1) \eta(t_2) \quad (1.47)$$

$$\times [m \delta'(t - t_1) \delta'(t - t_2) - V''(x_{\text{cl}}) \delta(t - t_1) \delta(t - t_2)] \quad (1.48)$$

$$= S[x_{\text{cl}}] + \int dt \left[ \frac{m}{2} \eta'(t)^2 - \frac{1}{2} V''(x_{\text{cl}}) \eta(t)^2 \right] \quad (1.49)$$

Le deuxième terme est l'action d'un oscillateur harmonique dont la fréquence dépend du temps:  $\frac{m\omega^2}{2} = V''(x_{\text{cl}}(t))$ .

Par analogie avec l'approximation de phase stationnaire, l'étape suivante consiste à décomposer l'intégrale de chemin de la façon suivante:

$$\int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}[x]} = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}[x_{\text{cl}}]} \int \mathcal{D}\eta e^{\frac{i}{\hbar}(\mathcal{S}[x_{\text{cl}}+\eta]-\mathcal{S}[x_{\text{cl}}])} \quad (1.50)$$

où dans le membre de droite la somme est limitée aux chemins  $\eta$  tels que  $\eta(t_i) = \eta(t_f) = 0$ . Si l'on se limite au développement au second ordre de  $\mathcal{S}[x_{\text{cl}} + \eta] - \mathcal{S}[x_{\text{cl}}]$ , on arrive à l'expression

$$G(x, t; x_0, t_0) \simeq e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}[x_{\text{cl}}]} \tilde{G}(0, t; 0, t_0) \quad (1.51)$$

où  $\tilde{G}$  est le propateur d'un oscillateur harmonique dont la fréquence dépend du temps.

### Remarques:

- Dans la mesure où l'intégrale de chemin n'est définie que par la procédure  $\lim_{N \rightarrow +\infty}$ , manipuler l'action n'est pas légitime *a priori*. C'est toute la puissance mais en même temps l'ambiguïté de l'intégrale de chemin. Elle suggère des manipulations très efficaces mais difficiles à justifier *a priori*. On essaie plutôt de vérifier la validité du résultat à la fin du calcul.
- Pour l'oscillateur harmonique,

$$\frac{\delta^3 S[x]}{\delta x(t_1)\delta x(t_2)\delta x(t_3)} = 0 \text{ et } V'' = m\omega^2 = \text{cte} \quad (1.52)$$

Le développement s'arrête donc au 2ème ordre, et on devrait retrouver le résultat exact. C'est effectivement le cas. Le calcul que nous faisons conduit à un propateur égal à

$$e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}[x_{\text{cl}}]} \times G(0, T; 0, 0)$$

puisque  $\eta_i = \eta_f = 0$ . Or, ce propateur est un cas particulier du propateur déjà calculé pour l'oscillateur harmaonique, et il redonne le bon préfacteur. La méthode est donc "justifiée".

Dans le cas général, le propateur  $\tilde{G}(0, t; 0, t_0)$  est défini comme toujours par la limite d'une intégrale multiple:

$$\begin{aligned} \tilde{G}(0, t; 0, t_0) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \int dx_1 \dots dx_N \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^N \left[ \frac{m}{2\epsilon} (x_{j+1} - x_j)^2 - \frac{1}{2} \epsilon C_j x_j^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.53)$$

avec  $c_j = V''(x_j)$ .

Comme pour l'oscillateur harmonique standard, on peut écrire l'exponentielle sous la forme

$$\exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N x_i A_{ij} x_j \right)$$

avec

$$A = \frac{m}{\hbar \epsilon i} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & 0 \\ -1 & & & \\ & & & \\ 0 & & & -1 \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix} + \frac{i\epsilon}{\hbar} \begin{pmatrix} c_1 & & 0 \\ & & \\ 0 & & c_N \end{pmatrix},$$

Il n'y a pas de matrice  $j$  car  $\eta(t_i) = \eta(t_f) = 0$ . On en déduit:

$$\begin{aligned} \tilde{G}(0, t; 0, t_0) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \frac{(2\pi)^{\frac{N}{2}}}{\sqrt{\det A}} \\ &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{\left( \frac{i\hbar \epsilon}{m} \right)^N \det A}} \\ &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{\det B}} \end{aligned} \quad (1.54)$$

avec

$$B = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & 0 \\ -1 & & & \\ & & & \\ 0 & & & -1 \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix} - \frac{\epsilon^2}{m} \begin{pmatrix} c_1 & & 0 \\ & & \\ 0 & & c_N \end{pmatrix}.$$

Posons  $p_N = \det B$ . Par le même raisonnement que pour  $\det A$ ,  $p_N$  satisfait la relation de récurrence

$$p_{N+1} = \left( 2 - \frac{\epsilon^2}{m} c_{N+1} \right) p_N - p_{N-1} \quad (1.55)$$

avec

$$p_1 = 2 - \frac{\epsilon^2}{m} c_1 \text{ et } p_0 = 1.$$

Cette équation peut se réécrire sous la forme

$$\frac{p_{N+1} - 2p_N + p_{N-1}}{\epsilon^2} = -\frac{c_{N+1} p_N}{m}. \quad (1.56)$$

Posons  $t_j = t_0 + j\epsilon = t_0 + j\frac{T}{N+1}$  et définissons une fonction  $\varphi(t)$  par

$$\varphi(t_j) = \epsilon p_j, \quad j = 0, \dots, N+1.$$

Il faut calculer  $\lim_{N \rightarrow +\infty} (\epsilon \det B) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \varphi(t)$ . Or,  $\varphi(t)$  satisfait l'équation

$$\begin{aligned} \frac{\varphi(t_j + \epsilon) - 2\varphi(t_j) + \varphi(t_j - \epsilon)}{\epsilon^3} &= -c_{j+1} \frac{\varphi(t_j)}{m\epsilon} \\ \Rightarrow \quad \frac{d^2\varphi}{dt^2} &= -\frac{c(t)}{m}\varphi \text{ quand } \epsilon \rightarrow 0, \\ \text{soit } m \frac{d^2\varphi}{dt^2} + c(t)\varphi &= 0. \end{aligned} \tag{1.57}$$

Les conditions initiales sont

$$\begin{aligned} \varphi(t_0) &= \epsilon p_0 \rightarrow 0 \\ \frac{d\varphi(t_0)}{dt} &= \epsilon \frac{p_1 - p_0}{\epsilon} = 2 - \frac{\epsilon^2}{m} c_1 - 1 \rightarrow 1. \end{aligned}$$

Le résultat final s'écrit

$$\boxed{G(x, t; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varphi(t)}} \exp \frac{i}{\hbar} [S_{cl}]} \tag{1.58}$$

où  $\varphi(t)$  est solution de l'équation différentielle

$$m \frac{d^2\varphi}{dt^2} + V''(x_{cl}(t))\varphi = 0 \text{ avec } \begin{cases} \varphi(t_0) = 0 \\ \frac{d\varphi}{dt}(t_0) = 1. \end{cases}$$

C'est l'expression semi-classique. Elle correspond à un développement asymptotique en  $\hbar$ .

### Remarques :

1. Cette approximation n'a de sens que si  $\varphi(t) \neq 0$ ! Si  $\varphi(t) = 0$ , il faut s'y prendre différemment. Le cas  $\varphi(t) = 0$  correspond à des systèmes où l'action n'a pas un minimum bien marqué.
2. Cette approximation ne peut être définie que si la trajectoire classique existe. Ce n'est pas toujours le cas. En particulier les particules peuvent traverser des barrières de potentiel en mécanique quantique. Dans ce cas, on peut encore faire un calcul approché du propagateur, mais il faut passer en temps imaginaire (voir chapitre suivant).
3. Sous cette forme, la mécanique classique est à la mécanique quantique ce que l'optique géométrique est à l'optique ondulatoire.

## Chapitre 2

# Action euclidienne et temps imaginaire

### 2.1 Définition

Bien que l'évolution temporelle soit décrite par l'opérateur  $e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$ , il est souvent utile de connaître le “propagateur euclidien” défini par

$$G_E(x, \tau; x_0, \tau_0) = \langle x | e^{-\frac{1}{\hbar}H(\tau-\tau_0)} | x_0 \rangle, \quad (2.1)$$

où  $\tau, \tau_0 \in \mathbb{R}$ .

La terminologie “euclidien” vient du fait que l'on passe du propagateur standard au propagateur euclidien en remplaçant  $it$  par  $\tau$ . Ce remplacement revient à passer de l'espace de Minkowski

$$\begin{aligned} x = (t, \vec{x}) &\Rightarrow x^2 = t^2 - \vec{x}^2 \\ \text{à } x = (\tau, \vec{x}) &\Rightarrow x^2 = -\tau^2 - \vec{x}^2 \end{aligned}$$

qui, au signe près, est une norme euclidienne. Comme  $\tau = it$ , on parle aussi de “propagateur en temps imaginaire”.

Comme le propagateur est une fonction infiniment dérivable pour  $t > t_0$ , le propagateur euclidien peut être obtenu à partir du propagateur standard en remplaçant  $t$  par  $-i\tau$ . En d'autres termes, on a :

$$G_E(x, \tau; x_0, \tau_0) = G(x, -i\tau; x_0, -i\tau). \quad (2.2)$$

L'un des avantages du propagateur euclidien est que sa représentation en termes d'intégrale de chemin est mieux définie. Le propagateur euclidien est en effet donné

par :

$$G_E(x, \tau; x_0, \tau_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left( \frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \\ \times \exp \left[ -\frac{\epsilon}{\hbar} \left( \sum_{j=0}^{N-1} \frac{m}{2} \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 + V(x_j) \right) \right]$$

avec  $\epsilon = \frac{\tau - \tau_0}{N}$ .

Cette formule peut se démontrer directement en utilisant la formule de Trotter, ou en remplaçant  $t$  par  $-i\tau$  dans l'expression de  $G(x, t; x_0, t_0)$  à l'aide d'une intégrale de chemin.

La différence fondamentale avec l'expression du propagateur standard à l'aide d'une intégrale de chemin vient du fait que la quantité sous l'intégrale est un nombre réel et positif. Il peut donc être interprété comme une densité de probabilité sur les chemins. D'un point de vue mathématique, le statut de cet objet est mieux défini, et la convergence des intégrales peut être démontrée moyennant certaines hypothèses sur  $V(x)$ .

Si l'on veut passer à la limite continue, la fonction qui intervient n'est plus l'action mais l'*action euclidienne* définie par

$$S_E[x] = \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau' \left[ m \frac{\dot{x}^2}{2} + V(x) \right]$$

où  $L_E(x) = m \frac{\dot{x}^2}{2} + V(x)$ , le lagrangien euclidien, se confond avec l'hamiltonien dans le cas présent. En termes de cette fonctionnelle, on a :

$$G_E(x, \tau; x_0, \tau_0) = \int \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x]}.$$

Outre le fait que c'est un objet qui conduit à une intégrale de chemin mieux définie, le propagateur euclidien apparaît naturellement dans plusieurs contextes :

- Mécanique statistique (fonction de partition) ;
- Mouvement brownien ;
- Effet tunnel.



## 2.2 Mécanique statistique quantique

En mécanique statistique quantique, l'objet central est la fonction de partition

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \text{Tr} \exp(-\beta H).$$

Considérons le cas d'une particule se déplaçant dans un potentiel unidimensionnel. Il est habituel de représenter la trace dans une base d'états propres  $|\varphi_n\rangle$  :

$$Z = \sum_n \langle \varphi_n | e^{-\beta H} | \varphi_n \rangle$$

mais on peut aussi utiliser la base continue  $|x\rangle$ . En injectant la relation de fermeture

$$\int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1},$$

on peut écrire :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_n \int dx \langle \varphi_n | x \rangle \langle x | e^{-\beta H} | \varphi_n \rangle \\ &= \int dx \sum_n \langle x | e^{-\beta H} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | x \rangle \\ \Rightarrow &\boxed{Z = \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle} \end{aligned}$$

Mais  $\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = G_E(x, \beta\hbar; x, 0)$

$$\Rightarrow \boxed{Z = \int dx G_E(x, \beta\hbar; x, 0)}$$

ou encore

$$\boxed{Z = \int dx G(x, -i\beta\hbar; x, 0)}.$$

La fonction de partition a donc une représentation en termes d'intégrale de chemin

$$Z = \int dx' \int_{x',0}^{x',\beta\hbar} \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x]}. \quad (2.3)$$

*Exemple : Oscillateur harmonique.* Puisque nous avons déjà calculé le propagateur de Feynman de l'oscillateur harmonique, utilisons-le pour calculer sa fonction de partition.

$$\begin{cases} \sin(-i\beta\hbar\omega) = \frac{e^{\beta\hbar\omega} - e^{-\beta\hbar\omega}}{2i} = \frac{1}{i} \sinh(\beta\hbar\omega) \\ \cos(-i\beta\hbar\omega) = \cosh(\beta\hbar\omega) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{i}{\hbar} S_{\text{cl}} = -\frac{m\omega}{\hbar \sinh(\beta\hbar\omega)} x'^2 [\cosh(\beta\hbar\omega) - 1],$$

avec  $x_i = x_f = x'$ . Mais  $\cosh x - 1 = 2 \sinh^2 \frac{x}{2}$ ,

$$\Rightarrow \quad \frac{i}{\hbar} S_{\text{cl}} = -\frac{2m\omega}{\hbar \sinh(\beta\hbar\omega)} \sinh^2 \left( \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) x'^2.$$

Le préfacteur s'écrit par ailleurs  $\left( \frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(\beta\hbar\omega)} \right)^{\frac{1}{2}}$ . Par une intégration gaussienne, on en déduit:

$$\begin{aligned} \int dx' G(x', -i\beta\hbar; x', 0) &= \sqrt{\frac{\pi\hbar \sinh(\beta\hbar\omega)}{2m\omega}} \frac{1}{\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \\ \Rightarrow \quad &\boxed{Z = \frac{1}{2 \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}}. \end{aligned}$$

C'est bien le résultat connu. En effet,

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} = e^{-\beta\hbar\omega/2} (1 + e^{-\beta\hbar\omega} + e^{-2\beta\hbar\omega} + \dots) = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \\ \Rightarrow \quad Z &= \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega/2} - e^{-\beta\hbar\omega/2}} = \frac{1}{2 \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \end{aligned}$$

### Limite classique :

Dans l'expression de  $Z$  sous forme d'une intégrale de chemin:

$$Z = \int dx' \int_{x',0}^{x',\beta\hbar} \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x]},$$

$\hbar$  apparaît à deux endroits : dans la limite de l'intégrale, et comme préfacteur de l'action. La limite  $\hbar \rightarrow 0$  n'est donc pas simplement une approximation du col. Quand  $\hbar \rightarrow 0$ , les chemins qui s'éloignent de  $x'$  pour y revenir après un temps infiniment court sont pénalisés par le terme  $\frac{d^2x}{d\tau^2}$ , et les chemins dominants restent proches de  $x'$ . Au premier ordre, on peut donc remplacer  $V(x(\tau))$  par  $V(x')$

$$\Rightarrow \quad Z = \int dx' e^{-\beta V(x')} \int_{x',0}^{x',\beta\hbar} \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar} S_E^0[x]},$$

où  $S_E^0[x]$  est l'action euclidienne d'une particule libre. Mais le propagateur d'une particule libre a déjà été calculé (cf page 11) et est indépendant de  $x'$ :

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad G(x', -i\beta\hbar; x', 0) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \\ \Rightarrow \quad &\boxed{Z_{\text{cl}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} \int dx' e^{-\beta V(x')}} \end{aligned}$$

$$\text{Or, } \int dp e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} = \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}$$

$$\Rightarrow Z_{\text{cl}} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp dq e^{-\beta H(p,q)}.$$

Au facteur  $\frac{1}{2\pi\hbar} = \frac{1}{h}$  près, qui donne une mesure dans l'espace des phases, c'est la statistique classique de Boltzmann.

Pour obtenir les corrections quantiques, il faut considérer, dans le propagateur  $G(x', t; x', 0)$ , les chemins qui s'éloignent peu du point  $x'$ . Posons  $x(\tau) = x' + \eta(\tau)$ . Si  $\eta(\tau)$  est petit, on peut faire un développement de  $V$  :

$$\begin{aligned} V(x' + \eta) &= V(x') + \eta V'(x') + \frac{1}{2} \eta^2 V''(x') + O(\eta^3) \\ &= V(x') - \frac{1}{2} \frac{V'(x')^2}{V''(x')} + \frac{1}{2} V''(x') \left[ \eta + \frac{V'(x')}{V''(x')} \right]^2 + O(\eta^3) \\ \Rightarrow G(x', t; x', 0) &\simeq \exp \frac{-i}{\hbar} \int_0^t \left( V(x') - \frac{V'(x')^2}{2V''(x')} \right) dt' \\ &\quad \times G_{\text{osc}} \left( \frac{V'(x')}{V''(x')}, t; \frac{V'(x')}{V''(x')}, 0 \right) \end{aligned}$$

où  $G_{\text{osc}}$  est le propagateur de l'oscillateur harmonique dont la fréquence est donnée par  $\frac{1}{2} V''(x') = \frac{1}{2} m\omega^2$ .

$$\begin{aligned} \Rightarrow G(x', t; x', 0) &\simeq \exp \frac{-it}{\hbar} \left( V - \frac{V'^2}{2V''} \right) \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t}} \\ &\quad \times \exp \left[ \frac{im\omega}{\hbar \sin \omega t} \left( \frac{V'}{V''} \right)^2 (\cos \omega t - 1) \right] \end{aligned}$$

où l'on a introduit les notations  $V \equiv V(x')$ ,  $V' \equiv V'(x')$ ,  $V'' \equiv V''(x')$ .

*Remarque:*  $V'(x') \neq 0$  car  $x = x'$  n'est pas la trajectoire classique.

Comme on cherche les corrections à la limite  $\hbar$  petit, on peut faire un développement autour de  $t = 0$  ( $t \rightarrow -i\beta\hbar$ ).

$$\begin{aligned}
\sin \omega t &= \omega t - \frac{\omega^3 t^3}{6} \\
\cos \omega t &= 1 - \frac{\omega^2 t^2}{2} + \frac{\omega^4 t^4}{24} \\
\Rightarrow G(x', t; x', 0) &\simeq \exp \left[ \frac{-it}{\hbar} \left( V - \frac{V'^2}{2V''} \right) \right] \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\omega^2 t^2}{6}}} \\
&\quad \times \exp \left[ \underbrace{\frac{im\omega^2 t^2/2}{\hbar t \left(1 - \frac{\omega^2 t^2}{6}\right)} \left( \frac{V'}{V''} \right)^2 \left( -1 + \frac{\omega^2 t^2}{12} \right)}_{\frac{it}{\hbar} \frac{V'^2}{2V''} \left( -1 - \frac{\omega^2 t^2}{12} \right) \text{ puisque } m\omega^2 = V''} \right] \\
\Rightarrow G(x', t; x', 0) &= \exp \frac{-itV}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \left( 1 + \frac{V'' t^2}{12m} \right) \exp \left( -\frac{it^3 V'^2}{24 \hbar m} \right).
\end{aligned}$$

On remplace  $t$  par  $-i\beta\hbar$  :

$$\begin{aligned}
\Rightarrow G(x', -i\beta\hbar; x', 0) &= \exp(-\beta V) \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \left( 1 - \frac{V'' \beta^2 \hbar^2}{12m} \right) \left( 1 + \frac{V'^2 \beta^3 \hbar^2}{24m} \right) \\
&= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} e^{-\beta V} \left( 1 + \frac{V'^2 \beta^3 \hbar^2}{24m} - \frac{V'' \beta^2 \hbar^2}{12m} \right).
\end{aligned}$$

Revenons à l'expression de la fonction de partition

$$Z = \int dx' G(x', -i\beta\hbar; x', 0).$$

Le propagateur  $G(x', -i\beta\hbar; x', 0)$  dépend de  $x'$  via  $V \equiv V(x')$ ,  $V' \equiv V'(x')$ ,  $V'' \equiv V''(x')$ . Mais

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta V(x')} V''(x') dx' &= - \int_{-\infty}^{+\infty} -\beta V'(x') e^{-\beta V(x')} V'(x') + \left[ e^{-\beta V(x')} V'(x') \right]_{-\infty}^{+\infty} \\
&= \beta \int_{-\infty}^{+\infty} V'(x')^2 e^{-\beta V(x')} dx'
\end{aligned}$$

si le potentiel diverge à l'infini, c'est-à-dire si la particule est confinée dans une région de l'espace. Dans ce cas, on en déduit:

$$\boxed{Z = \int dx \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} e^{-\beta V(x)} \left[ 1 - \frac{\beta^3 \hbar^2}{24m} (V'(x))^2 \right].}$$

C'est le début du développement de Wigner-Kirkwood. Il contient les corrections d'ordre  $\hbar^2$  à la fonction de partition classique.

## 2.3 Mouvement brownien

L'interprétation du propagateur comme somme sur tous les chemins possibles est intuitive mais purement formelle. Dans sa version euclidienne, le propagateur correspond effectivement à une somme sur les chemins possibles dans le cadre du mouvement brownien.

Pour décrire le mouvement d'une particule en suspension dans un liquide, Einstein a proposé d'abandonner une description purement déterministe et a suggéré une description probabiliste du mouvement : à chaque instant, la particule a une certaine probabilité d'effectuer un saut, et la description physique est basée sur la probabilité pour une particule d'aller d'un point à un autre en un temps donné.

Dans le cas d'un mouvement unidimensionnel, l'hypothèse la plus simple est d'admettre que la particule a une probabilité  $\frac{1}{2}$  de faire un saut d'amplitude  $a$  pendant un temps  $\tau$  à droite ou à gauche. Si on définit la probabilité  $P(na, k\tau)$  pour la particule de se trouver au point  $na$  à l'instant  $k\tau$  ( $n$  et  $k$  entiers), on a alors l'équation fondamentale :

$$P(na, (k+1)\tau) = \frac{1}{2} [P((n-1)a, k\tau) + P((n+1)a, k\tau)]. \quad (2.4)$$

Dans la limite où  $a$  et  $\tau$  tendent vers 0, on peut faire apparaître des dérivées en retranchant de chaque côté  $P(na, k\tau)$  :

$$\begin{aligned} P(na, (k+1)\tau) - P(na, k\tau) &= \frac{1}{2} [P((n-1)a, k\tau) - 2P(na, k\tau) + P((n+1)a, k\tau)] \\ \Rightarrow \quad \tau \frac{\partial P}{\partial t}(na, k\tau) &= \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}(na, k\tau). \end{aligned}$$

Si  $a$  et  $\tau$  tendent vers 0 de telle façon que  $D = \frac{a^2}{2\tau}$  tende vers une valeur finie, la limite continue de  $P$  satisfait l'équation différentielle :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \quad (2.5)$$

C'est l'équation de la diffusion. Le coefficient  $D$  s'appelle coefficient de diffusion.

*Normalisation* :  $\int dx P(x, t) = 1$ .

*Condition initiale* :  $\lim_{t \rightarrow t_0} P(x, t; x_0, t_0) = \delta(x - x_0)$   
(la particule est en  $x_0$  à  $t_0$ ).

Cette équation est satisfaite par :

$$\begin{aligned}
 P(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \\
 \text{En effet, } \frac{\partial P}{\partial t} &= -\frac{1}{2} t^{-3/2} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} + t^{-5/2} \frac{x^2}{4D} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \\
 \frac{\partial P}{\partial x} &= t^{-1/2} \frac{-x}{2Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \\
 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} &= \frac{-1}{2D} t^{-3/2} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} + t^{-5/2} \frac{x^2}{4D} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \\
 \Rightarrow D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} &= \frac{\partial P}{\partial t}.
 \end{aligned}$$

Avec la condition aux limites et la normalisation, on trouve :

$$P(x, t; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{1}{4\pi D(t-t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4D(t-t_0)}}.$$

On reconnaît le propagateur euclidien dans lequel on a remplacé  $m$  par  $\frac{\hbar}{2D}$ . Le propagateur euclidien correspond donc à la probabilité de transition d'un point à un autre pour une particule classique brownienne.

Le mouvement brownien permet de définir une mesure dans l'espace des chemins. Considérons en effet tous les chemins partant de  $x_0, t_0$  et arrivant à  $x, t$ , et considérons  $N$  temps intermédiaires tels que

$$t_0 < t_1 < \dots < t_N < t.$$

La valeur moyenne d'une fonctionnelle de la forme

$$\mathcal{F}[x(t_1), \dots, x(t_N)]$$

prise sur tous les chemins browniens allant de  $x_0, t_0$  à  $x, t$  est *définie* par

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{F} \rangle &\equiv \int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_N \\
 &\quad \times P(x_1 t_1, x_0 t_0) P(x_2 t_2, x_1 t_1) \dots P(x t, x_N t_N) \mathcal{F}[x_1, \dots, x_N]
 \end{aligned}$$

On note cette valeur moyenne

$$\int_{x_0 t_0}^{x t} dW \mathcal{F},$$

où  $dW$  définit la mesure de Wiener. Elle satisfait :

$$\int_{x_0 t_0}^{x t} dW = P(x t, x_0 t_0) \quad (\text{à vérifier}).$$

Si on a une fonctionnelle plus compliquée du type

$$\mathcal{F}[x] = e^{-\int_{t_0}^t d\tau V[x(\tau)]}$$

la valeur moyenne est définie par une intégrale de chemin :

$$P_V(xt, x_0t_0) \equiv \lim_{N \rightarrow +\infty} \int_{x_0t_0}^{xt} dW \exp \left( -\epsilon \sum_{k=0}^N V[x(t_k)] \right).$$

Cette fonction  $P_V(xt, x_0t_0)$  est le propagateur euclidien d'un hamiltonien dont le potentiel est  $V(x)$ . Il satisfait donc l'équation différentielle

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} P_V(xt, x_0t_0) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_V(xt, x_0t_0) - V(x) P_V(xt, x_0t_0) \\ \lim_{t \rightarrow 0} P_V(xt, x_0t_0) = \delta(x - x_0). \end{cases}$$

Ce résultat est connu sous le nom de formule de Feynman-Kac. Il se démontre exactement comme l'expression du propagateur en terme d'intégrale de chemin :  $P_V(xt, x_0t_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \dots$  est précisément ce qu'on obtiendrait à partir du propagateur euclidien pour un potentiel  $V$  en utilisant la formule de Trotter.

*Remarques :*

1. Le fait que  $\frac{a^2}{\tau}$  soit constant dans le passage à la limite continue montre que le long d'un chemin typique parcouru à vitesse constante,  $\Delta x \propto \sqrt{\Delta \tau}$ . On voit donc que  $\lim_{\Delta \tau} \frac{\Delta x}{\Delta \tau}$  diverge  $\Rightarrow$  les chemins browniens ne sont pas dérivables. C'est l'origine des problèmes rencontrés dans la définition de l'intégrale de chemin avec le potentiel vecteur  $(\frac{1}{2}(A(x_i) + A(x_{i+1})))$ .
2. Si  $V(x)$  est la probabilité que la particule soit détruite pendant une unité de temps, comme

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \prod_{k=0}^N \left( 1 - \frac{(t - t_0)}{N} V(x(t_k)) \right) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \exp \left( -\frac{(t - t_0)}{N} \sum_{k=0}^N V(x(t_k)) \right),$$

le calcul précédent s'applique. La formule de Feynman-Kac a donc ramené le problème d'une intégrale fonctionnelle à la solution d'une équation différentielle.

## 2.4 L'effet tunnel

Considérons le potentiel

$$V(x) = \frac{g^2}{8} (x^2 - a^2)^2$$

et essayons de calculer le propagateur

$$G(a, +\infty; -a, -\infty) = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}$$

avec  $S[x] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right].$

Si l'on essaie de faire une approximation semi-classique, il faut trouver une trajectoire satisfaisant l'équation

$$\begin{cases} m\ddot{x} = -\mathcal{V}'(x) \\ x(-\infty) = -a \\ x(+\infty) = a. \end{cases}$$

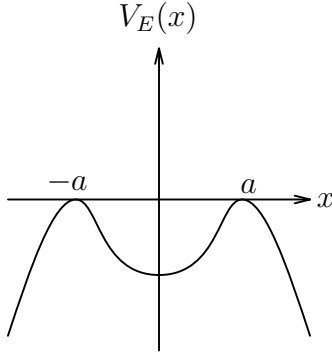
Malheureusement, il est clair qu'il n'y a pas de trajectoire classique satisfaisant ces équations: pour être en  $x = -a$  à  $t = -\infty$ , la particule doit être au repos, et elle ne peut pas passer par dessus la barrière. Par conséquent, l'approximation classique pour  $G(a, +\infty; -a, -\infty)$  n'est pas définie.

Il est néanmoins possible d'obtenir une approximation du même type en considérant la version euclidienne :

$$G_E(a, +\infty; -a, -\infty) = \int \mathcal{D}x e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x]}$$

$$S_E[x] = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \mathcal{V}_E(x) \right].$$

Le potentiel effectif pour ce mouvement est égal à  $\mathcal{V}_E(x) = -\mathcal{V}(x)$ .



Il doit donc exister une trajectoire classique pour aller d'un maximum à l'autre.

Cette trajectoire doit satisfaire :

$$\begin{cases} m\ddot{x} = -\mathcal{V}'_E(x) = V'(x) \\ x(-\infty) = -a \\ x(+\infty) = a \end{cases}$$

La fonction  $x(t) = a \tanh \frac{\omega(t - t_c)}{2}$ .

$$\begin{cases} t_c & \text{quelconque} \\ m\omega^2 & = g^2 a^2 \end{cases}$$



est solution du problème. En effet,

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \frac{a\omega}{2} \left( 1 - \tanh^2 \frac{\omega(t-t_c)}{2} \right) \\ &= -\frac{\omega}{2a}(x^2 - a^2), \\ \ddot{x} &= -\frac{\omega}{a}x\dot{x} = \frac{\omega^2}{2a^2}x(x^2 - a^2) = \frac{1}{m}V'(x).\end{aligned}$$

On peut donc essayer de faire une approximation du col autour de cette solution pour obtenir une expression approchée du propagateur euclidien, et donc du propagateur de Feynman. Il se trouve qu'il y a encore une difficulté liée au fait qu'il y a une infinité de solutions puisque  $t_c$  est arbitraire. Du coup, l'équivalent de la fonction  $\varphi(t)$  de l'approximation semi-classique est égale à 0. On ne peut donc pas utiliser aveuglément la formule semi-classique. C'est le problème des *instantons* (voir exercices).



## Chapitre 3

# Transitions de phase et intégrale de chemin

La théorie moderne des transitions de phase, et en particulier le calcul des exposants critiques, est basée sur l'utilisation de la théorie quantique des champs pour évaluer la fonction de partition. Le lien se fait en exprimant la fonction de partition comme une intégrale de chemin pour un champ scalaire. Comme cette théorie des champs est la plus simple (par opposition aux théories de champs pour les fermions ou aux théories de jauge), il est désormais habituel de présenter la théorie des champs en commençant par cette application.

### 3.1 Modèle d'Ising: Introduction et généralités

Les problèmes rencontrés en physique statistique sont souvent des modèles sur réseau, l'application la plus ancienne – mais toujours d'actualité! – étant le magnétisme. Dans ce chapitre, nous allons voir comment on peut exprimer la fonction de partition d'un tel modèle à l'aide d'une intégrale de chemin sur le cas particulier du modèle d'Ising. Dans ce modèle, on représente le spin aux sites  $i$  d'un réseau par une variable  $\sigma_i$  qui peut prendre les valeurs  $\pm 1$ , et l'énergie d'une configuration est donnée par

$$E(\{\sigma_i\}) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{j=1}^N B_j \sigma_j$$

$$\begin{cases} J_{ij} &= \text{constante de couplage} \\ B_j &= \text{champ magnétique au site } j \end{cases}$$

Résoudre ce problème suppose qu'on connaît:

- La fonction de partition  $Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta E(\{\sigma_i\})}$

- L'aimantation sur site  $\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i e^{-\beta E(\{\sigma_i\})}$
- La fonction de corrélation à deux points:  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i \sigma_j e^{-\beta E(\{\sigma_i\})}$ .

En général, il suffit de résoudre ce problème pour un champ magnétique uniforme ( $B_j = B$  indépendant de  $j$ ) et dans la limite  $B \rightarrow 0$ , mais le calcul de  $Z$  pour  $B$  quelconque n'est pas plus difficile, et on en déduit aisément  $\langle \sigma_i \rangle$  et  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ . En effet,

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial B_i} &= \sum_{\{\sigma_i\}} \beta \sigma_i e^{-\beta E(\{\sigma_i\})} \\ \Rightarrow \langle \sigma_i \rangle &= \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial B_i} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial (\ln Z)}{\partial B_i}. \end{aligned}$$

De même,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 Z}{\partial B_i \partial B_j} &= \beta^2 \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i \sigma_j e^{-\beta E(\{\sigma_i\})} \\ \Rightarrow \langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B_i \partial B_j}. \end{aligned}$$

Il est donc suffisant de connaître  $Z(\{B_j\})$  pour connaître toutes les fonctions de corrélation.  $Z(\{B_j\})$  est appelé *fonction génératrice* des fonctions de corrélation.

Enfin, si  $\langle \sigma_i \rangle \neq 0$ , la corrélation entre les spins est mieux représentée par la quantité :

$$\begin{aligned} G_{ij} &\equiv \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \\ \text{soit } G_{ij} &= \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B_i \partial B_j} - \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial B_i} \frac{\partial Z}{\partial B_j} \end{aligned}$$

Mais

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B_i \partial B_j} &= \frac{\partial}{\partial B_j} \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial B_i} \right) \\ &= -\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial B_j} \frac{\partial Z}{\partial B_i} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B_i \partial B_j} \\ \Rightarrow G_{ij} &= \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B_i \partial B_j}. \end{aligned}$$

$G_{ij}$  s'appelle la *fonction de corrélation connexe*, une terminologie qui vient du calcul perturbatif de cette quantité, et  $\ln Z$  s'appelle la *fonction génératrice des fonctions de corrélation connexes*. Pour toutes ces quantités,  $Z(\{B_i\})$  est la quantité de référence.

Pour discuter la physique, il est plus intuitif de changer de variables et de décrire le système en termes des aimantations  $m_i \equiv \langle \sigma_i \rangle$  plutôt que des champs magnétiques  $B_i$ . Cela se fait à l'aide d'une transformation de Legendre qui fait passer de l'énergie libre  $F(\beta; \{B_i\}) \equiv -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta; \{B_i\})$  au potentiel thermodynamique (ou de Gibbs)

$$\Gamma(\beta; \{m_i\}) = F(\beta; \{B_i(\{m_j\})\}) + \sum_i B_i m_i$$

où la relation  $B_i(\{m_j\})$  est donnée implicitement par  $m_i = -\frac{\partial F}{\partial B_i}$ .

Les dérivées de  $\Gamma$  sont également utiles :

$$\begin{aligned} \bullet \quad \frac{\partial \Gamma}{\partial m_i} &= \sum_j \underbrace{\frac{\partial F}{\partial B_j}}_{=-m_j} \frac{\partial B_j}{\partial m_i} + B_i + \sum_j \frac{\partial B_j}{\partial m_i} m_j \\ \Rightarrow \quad \frac{\partial \Gamma}{\partial m_i} &= B_i \\ \bullet \quad \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial m_i \partial m_j} &= \frac{\partial B_i}{\partial m_j}. \end{aligned}$$

Mais si on considère  $B_i$  comme fonction des  $m_j$ , eux-mêmes fonctions des  $B_k$ , on a évidemment :

$$\frac{\partial B_i(m_j(B_k))}{\partial B_k} = \delta_{ik} = \sum_j \underbrace{\frac{\partial B_i}{\partial m_j}}_{\frac{\partial^2 \Gamma}{\partial m_i \partial m_j}} \underbrace{\frac{\partial m_j}{\partial B_k}}_{\beta G_{jk}}.$$

On en déduit que

$$\frac{\partial^2 \Gamma}{\partial m_i \partial m_j} = \frac{1}{\beta} (G^{-1})_{ij}.$$

## 3.2 Champ moyen

La première chose à faire dans un modèle de physique statistique est une approche de type champ moyen où l'on suppose que les fluctuations des degrés de liberté par rapport à leurs valeurs moyennes sont petites. Plus précisément, dans le cas du modèle d'Ising, on définit

$$\delta \sigma_i = \sigma_i - \langle \sigma_i \rangle$$

et on néglige les termes d'ordre 2 en  $\delta\sigma$  :

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \sigma_i \sigma_j &= (\delta\sigma_i + \langle \sigma_i \rangle) (\delta\sigma_j + \langle \sigma_j \rangle) \\
&\simeq \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle + \delta\sigma_i \langle \sigma_j \rangle + \delta\sigma_j \langle \sigma_i \rangle \\
&= \sigma_i \langle \sigma_j \rangle + \sigma_j \langle \sigma_i \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \\
\text{d'où} \quad E &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\sigma_i \langle \sigma_j \rangle + \sigma_j \langle \sigma_i \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle) - \sum_i B_i \sigma_i \\
&= -\sum_i \underbrace{\left( B_i + \sum_j J_{ij} \langle \sigma_j \rangle \right)}_{B_i^{\text{eff}}} \sigma_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle.
\end{aligned}$$

On s'est ramené à un système paramagnétique de spins découplés :

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H} = e^{-\frac{\beta}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle} \prod_i Z_i$$

avec

$$Z_i = \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{\beta B_i^{\text{eff}} \sigma_i} = 2 \cosh(\beta B_i^{\text{eff}})$$

et

$$m_i \equiv \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B_i} = \tanh \left[ \beta \left( B_i + \sum_j J_{ij} m_j \right) \right].$$

L'aimantation est donc reliée au champ et à la température par l'équation de champ moyen

$$m_i = \tanh \left[ \beta \left( B_i + \sum_j J_{ij} m_j \right) \right].$$

En champ nul, on a en particulier:

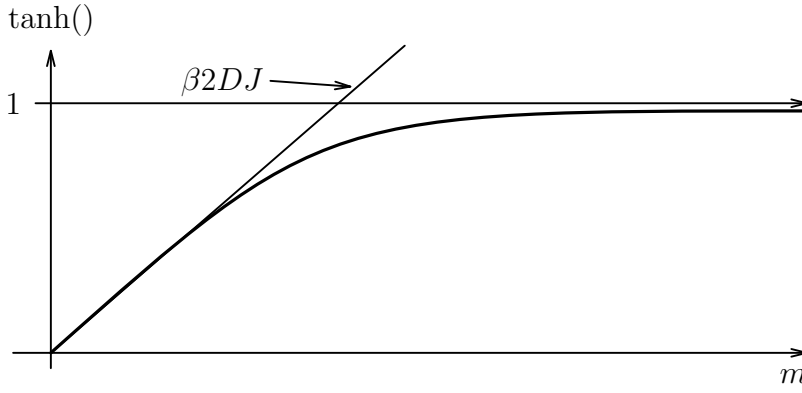
$$m_i = \tanh \left( \beta \sum_j J_{ij} m_j \right).$$

La configuration où  $m_i = 0$  pour tout  $i$  est toujours solution. Mais il doit exister une autre solution à basse température. Considérons pour être concret le cas d'un réseau cubique en dimension  $D$  avec couplages  $J$  entre premiers voisins uniquement ( $J > 0$ ). A  $T = 0$ , la configuration de plus basse énergie correspond à  $m_i = +1$  (ou  $m_i = -1$ ). Cherchons donc à partir de quelle température il existe une solution uniforme

$$m_i = m \quad (\forall i).$$

Elle doit satisfaire l'équation

$$m = \tanh(\beta m 2DJ).$$



Cette équation a une solution non nulle si et seulement si  $\beta 2DJ > 1$

$$\Rightarrow T < 2DJ.$$

Il y a donc une température  $T_0$  en dessous de laquelle le champ moyen prédit l'existence d'une aimantation spontanée.

Pour expliciter le contenu physique de la solution champ moyen, il est commode (mais pas indispensable) de calculer le potentiel thermodynamique.

La relation champ moyen

$$m_i = \tanh \left[ \beta (B_i + \sum_j J_{ij} m_j) \right]$$

s'inverse en

$$B_i = \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} m_i - \sum_j J_{ij} m_j.$$

L'énergie libre est donnée par :

$$\begin{aligned} F(\beta; \{B_i\}) &= -\frac{1}{\beta} N \ln 2 - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln \cosh \left[ \beta (B_i + \sum_j J_{ij} m_j) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j \\ \Rightarrow \Gamma(\beta; \{m_i\}) &= F(\beta; \{B_i(m_j)\}) + \sum_i B_i m_i \\ &= -\frac{1}{\beta} N \ln 2 - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln \cosh \tanh^{-1}(m_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j \\ &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_i m_i \tanh^{-1} m_i - \sum_{i,j} m_i J_{ij} m_j. \end{aligned}$$

Or,  $\cosh(\tanh^{-1} x) = (1 - x^2)^{-1/2}$ . En effet,

$$y = \tanh^{-1} x \Rightarrow 1 - x^2 = 1 - \tanh^2 y = \frac{\cosh^2 y - \sinh^2 y}{\cosh^2 y} = \frac{1}{\cosh^2 y}.$$

De plus,  $\tanh^{-1}(x) = \frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x}$ . En effet, si  $y = \tanh^{-1} x$ ,

$$\frac{1}{2} \ln \frac{1 + \tanh y}{1 - \tanh y} = \frac{1}{2} \ln \frac{\cosh y + \sinh y}{\cosh y - \sinh y} = \frac{1}{2} \ln \frac{2e^y}{2e^{-y}} = \frac{1}{2} \ln (e^{2y}) = y$$

$$\begin{aligned} \Gamma(\beta; \{m_i\}) &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} m_i J_{ij} m_j - \frac{N}{\beta} \ln 2 \\ &\quad + \frac{1}{2\beta} \sum_i \{(1+m_i) \ln(1+m_i) + (1-m_i) \ln(1-m_i)\}. \end{aligned}$$

### Susceptibilité uniforme :

Si on s'intéresse aux solutions uniformes,  $m = m_i$ , et pour un réseau cubique en dimension  $D$  avec  $J > 0$  entre premiers voisins, il vient :

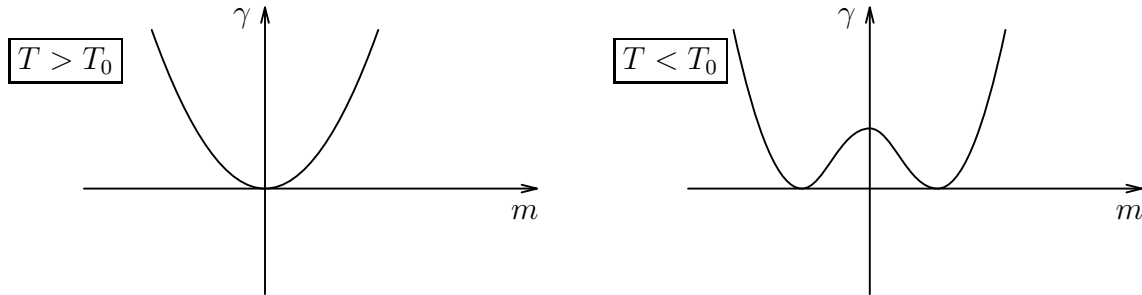
$$\begin{aligned} \Gamma(\beta; m) &= -NJDm^2 - \frac{N}{\beta} \ln 2 \\ &\quad + \frac{N}{2\beta} \{(1+m) \ln(1+m) + (1-m) \ln(1-m)\}. \end{aligned}$$

Le potentiel de Gibbs par site  $\gamma \equiv \Gamma/N$  est donné, pour  $m$  petit, par :

$$\begin{aligned} \gamma(\beta; m) &= -T \ln 2 + \frac{m^2}{2}(T - 2JD) + \frac{T}{12}m^4 \\ \text{puisque } \ln(1+m) &= m - \frac{m^2}{2} + \frac{m^3}{3} + O(m^4) \end{aligned}$$

d'où

$$\gamma(\beta; m) = -T \ln 2 + \frac{m^2}{2}(T - T_0) + \frac{T}{12}m^4.$$



Il y a donc une transition de phase à  $T_c$  puisque le minimum se déplace de  $m = 0$  à une valeur finie (deux fois dégénérée).



Par définition, la susceptibilité magnétique est la dérivée de l'aimantation par rapport au champ en champ nul. Son inverse est donc donné par :

$$\chi^{-1} = \left. \frac{\partial B}{\partial m} \right|_{m=0} = \left. \frac{\partial^2 \gamma}{\partial m^2} \right|_{m=0} = T - T_0$$

$$\text{soit} \quad \chi = (T - T_0)^{-1}.$$

De façon générale, des arguments de lois d'échelle prédisent que la susceptibilité doit se comporter comme  $\chi \propto (T - T_c)^{-\gamma}$  au voisinage de la température critique, où  $\gamma$  est un exposant critique. A l'approximation du champ moyen, l'exposant critique  $\gamma = 1$ .

### Fonction de corrélation :

Comme l'approximation champ moyen consiste à négliger  $\delta\sigma_i\delta\sigma_j$ , elle ne peut être précise que dans un domaine de température où  $\langle \delta\sigma_i\delta\sigma_j \rangle$  est petit (condition nécessaire). Calculons donc

$$\langle \delta\sigma_i\delta\sigma_j \rangle = \langle \sigma_i\sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = G_{ij}.$$

Ce calcul se fait aisément à l'aide de  $\Gamma$  puisque

$$\frac{1}{\beta}(G^{-1})_{ij} = \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial m_i \partial m_j},$$

soit

$$(TG^{-1})_{ij} = -J_{ij} + \delta_{ij} \frac{1}{2\beta} \left( \frac{1}{1+m_i} + \frac{1}{1-m_i} \right).$$

En effet,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}[(1+x)\ln(1+x)] &= \ln(1+x) + 1 \\ \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}[(1+x)\ln(1+x)] &= \frac{1}{1+x}. \end{aligned}$$

Mais dans la phase haute température,  $m_i = 0 \Rightarrow T(G^{-1})_{ij} = -J_{ij} + T\delta_{ij}$ .

Toujours dans le cas d'un réseau cubique en dimension  $D$  avec couplages entre

premiers voisins, on peut introduire la transformée de Fourier

$$\begin{aligned}
J(\vec{q}) &= \sum_i e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} J_{ij} = 2J \sum_{\alpha=1}^D \cos q_\alpha \\
\Rightarrow T(G^{-1})(\vec{q}) &= \sum_i e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} T(G^{-1})_{ij} \\
&= -2J \sum_{\alpha=1}^D \cos q_\alpha + T \underbrace{\sum_i e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \delta_{ij}}_{=1} \\
\Rightarrow G(\vec{q}) &= \frac{T}{T - 2J \sum_{\alpha=1}^D \cos q_\alpha}
\end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned}
G_{ij} &= \frac{1}{(2\pi)^D} \int_{ZB} d\vec{q} G(\vec{q}) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \\
&= \frac{T}{(2\pi)^D} \int_{ZB} d\vec{q} \frac{e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}}{T - 2J \sum_{\alpha=1}^D \cos q_\alpha}
\end{aligned}$$

Cette intégrale est dominée par les petites valeurs de  $q$  (le dénominateur est plus grand)

$$\Rightarrow G_{ij} \simeq \frac{T}{(2\pi)^D} \int_{ZB} d\vec{q} \frac{e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}}{T - T_0 + Jq^2}.$$

Considérons le cas  $D=3$ , et posons  $\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ .

$$\begin{aligned}
G(\vec{r}) &= \frac{T}{(2\pi)^3} \int 2\pi \sin \theta d\theta \int_0^{+\infty} q^2 dq \frac{e^{-qir \cos \theta}}{\frac{T-T_0}{J} + q^2} \frac{1}{J} \\
&= \frac{T}{J(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \frac{q^2 dq}{\xi^{-2} + q^2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{-iqr \cos \theta}
\end{aligned}$$

avec  $\xi^{-2} = \frac{T-T_0}{J}$ .

$$\begin{aligned}
G(\vec{r}) &= \frac{T}{J(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \frac{q^2 dq}{\xi^{-2} + q^2} \int_{-1}^1 du e^{iqur} \quad (u = -\cos \theta) \\
&= \frac{T}{J(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} \frac{q^2 dq}{\xi^{-2} + q^2} \frac{2 \sin qr}{qr} \\
&= \frac{T}{J(2\pi)^2} \frac{1}{r} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q dq \sin qr}{\xi^{-2} + q^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Mais } \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q dq \sin qr}{\xi^{-2} + q^2} &= \text{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q e^{iqr} dq}{(q + i\xi^{-1})(q - i\xi^{-1})} \\
&= \pi \frac{\xi^{-1} e^{-r/\xi}}{\xi^{-1}} = \pi e^{-r/\xi}
\end{aligned}$$

Ce dernier résultat s'obtient en passant dans le plan complexe, et en fermant le contour par le haut pour englober le pôle à  $q = i\xi^{-1}$ .

$$\begin{aligned}
\text{Ainsi, } G(r) &= \frac{T}{Jr} \frac{1}{2\pi} e^{-r/\xi} \\
\xi &= \sqrt{\frac{J}{T - T_0}} \quad \text{longueur de corrélation.}
\end{aligned}$$

Les lois d'échelle prédisent que la longueur de corrélation diverge comme  $(T - T_c)^{-\nu}$ , où  $\nu$  est un nouvel exposant critique. On a démontré que l'exposant critique  $\nu = \frac{1}{2}$  à l'approximation du champ moyen.

Loin de  $T_c$ ,  $\xi$  est petit et  $G_{ij}$  est très petit. Dans ce cas, le champ moyen est une bonne approximation. Mais près de  $T_c$ , les spins sont corrélés sur de grandes distances,  $G_{ij}$  n'est pas petit, et le champ moyen ne peut pas être bon *a priori*.

### 3.3 Modèle d'Ising et intégrale de chemin

Le champ moyen tel qu'il a été formulé dans la section précédente ne donne pas naturellement naissance à une méthode permettant d'inclure des corrections. Cela peut être fait de façon systématique en reformulant le problème comme une intégrale de chemin.

Essayons d'exprimer  $Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta E}$  à l'aide d'une intégrale multiple. On peut écrire

$$e^{-\beta E} = e^{\frac{1}{2} \sum \sigma (\beta J) \sigma + \beta \sum B \sigma}$$

où on a introduit les notations

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N) \\ J = \begin{pmatrix} J_{11} & J_{12} & & \\ J_{21} & J_{22} & & \\ & & \ddots & \end{pmatrix} \\ B = (B_1, \dots, B_N). \end{array} \right.$$

Il est commode d'inclure la température inverse  $\beta$  dans les matrices en définissant :

$$\begin{aligned} A &= \beta J \\ H &= \beta B \\ \Rightarrow Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\frac{1}{2} {}^t \sigma A \sigma + {}^t H \sigma}. \end{aligned}$$

L'idée de base est d'utiliser l'intégrale gaussienne pour ramener cette expression à une expression *linéaire* en  $\sigma$ , ce qui permettra d'effectuer simplement la somme sur  $\{\sigma_i\}$ . Or, d'après la formule de base de l'intégration gaussienne,

$$e^{\frac{1}{2} {}^t \sigma A \sigma} = \frac{1}{Z(0)} \int \prod_{i=1}^N dx_i e^{-\frac{1}{2} {}^t x A^{-1} x + {}^t \sigma x}$$

avec

$$\begin{aligned} Z(0) &= (2\pi)^{N/2} \frac{1}{\sqrt{\det A^{-1}}} = (2\pi)^{N/2} \sqrt{\det A} \\ \Rightarrow Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} \frac{1}{(2\pi)^{N/2} \sqrt{\det A}} \int dx_1 \dots dx_N e^{-\frac{1}{2} {}^t x A^{-1} x + {}^t \sigma x + {}^t \sigma H} \end{aligned}$$

(on a utilisé  ${}^t \sigma H = {}^t H \sigma$ ).

Effectuons maintenant le changement de variable  $\varphi = x + H \Rightarrow x = \varphi - H$  :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} {}^t x A^{-1} x &= -\frac{1}{2} ({}^t \varphi - {}^t H) A^{-1} (\varphi - H) \\ &= -\frac{1}{2} {}^t \varphi A^{-1} \varphi + \frac{1}{2} {}^t H A^{-1} \varphi + \frac{1}{2} {}^t \varphi A^{-1} H - \frac{1}{2} {}^t H A^{-1} H \\ &= -\frac{1}{2} {}^t \varphi A^{-1} \varphi + {}^t H A^{-1} \varphi - \frac{1}{2} {}^t H A^{-1} H \\ \Rightarrow Z &= \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \frac{1}{\sqrt{\det A}} e^{-\frac{1}{2} {}^t H A^{-1} H} \int d\varphi_1 \dots d\varphi_N e^{-\frac{1}{2} {}^t \varphi A^{-1} \varphi + {}^t H A^{-1} \varphi} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{t \sigma \varphi}. \end{aligned}$$

La somme sur  $\{\sigma_i\}$  peut maintenant être effectuée très simplement :

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{\sigma_1=\pm 1 \\ \sigma_2=\pm 1 \\ \vdots}} e^{\sigma_1 \varphi_1} e^{\sigma_2 \varphi_2} \dots e^{\sigma_N \varphi_N} &= \prod_i \sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{\sigma_i \varphi_i} \\ &= \prod_i (e^{\varphi_i} + e^{-\varphi_i}) \\ &= 2^N \prod_i \cosh(\varphi_i). \end{aligned}$$

On écrit cette expression  $\exp(-U(\varphi))$  avec  $U(\varphi) = -\sum_i \ln \cosh(\varphi_i) - N \ln 2$ . En remplaçant  $A$  et  $H$  par leurs valeurs en fonction de  $J$  et  $B$ , on trouve finalement

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \frac{e^{-\frac{\beta}{2} {}^t B J^{-1} B}}{\sqrt{\det \beta J}} \int d\varphi_1 \dots d\varphi_N \exp \left( -\frac{1}{2\beta} {}^t \varphi J^{-1} \varphi + {}^t B J^{-1} \varphi - U(\varphi) \right).$$

Cette expression est semblable à l'expression du propagateur euclidien,  $\varphi_i$  jouant le rôle de  $x_i$ . La différence majeure vient du fait que  $i$  prend des valeurs sur un réseau de dimension  $D$ , alors que dans le cas du propagateur,  $i$  prend des valeurs de 1 à  $N$ , donc sur un réseau de dimension 1. Autrement dit, la forme générale de la fonction de partition à la limite continue est

$$Z \propto \int \mathcal{D}\varphi e^{-S[\varphi]}$$

où l'action est une intégrale multiple :

$$S[\varphi] = \int d^d \vec{r} L[\varphi].$$

### Champ moyen

L'approximation la plus simple consiste à faire une approximation du col sur cette intégrale multiple. L'exposant s'écrit

$$\begin{aligned} S(\{\varphi_i\}) &= \frac{1}{2\beta} \sum_{i,j} J_{ij}^{-1} \varphi_i \varphi_j - \sum_{i,j} J_{ij}^{-1} B_i \varphi_j - \sum_i \ln \cosh \varphi_i - N \ln 2 \\ \frac{\partial S}{\partial \varphi_i} &= \frac{1}{\beta} \sum_j J_{ij}^{-1} \varphi_j - \sum_j J_{ij}^{-1} B_j - \tanh \varphi_i = 0. \end{aligned}$$

Notons  $\bar{\varphi}_i$  la solution de ce système. L'approximation d'ordre 0 pour  $Z$  s'écrit donc

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \frac{e^{-\frac{\beta}{2} {}^t B J^{-1} B}}{\sqrt{\det \beta J}} e^{-S[\bar{\varphi}]} \quad (3.1)$$

A une constante près, on a donc :

$$\ln Z = -\frac{\beta}{2} {}^t B J^{-1} B - \frac{1}{2\beta} {}^t \bar{\varphi} J^{-1} \bar{\varphi} + {}^t B J^{-1} \bar{\varphi} + U(\bar{\varphi})$$

soit

$$\ln Z = -\frac{\beta}{2} \sum_{i,j} B_i J_{ij}^{-1} B_j - \frac{1}{2\beta} \sum_{i,j} \bar{\varphi}_i J_{ij}^{-1} \bar{\varphi}_j + \sum_{i,j} B_i J_{ij}^{-1} \bar{\varphi}_j + U(\bar{\varphi})$$

Or, l'aimantation est donnée par

$$m_i = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial(\ln Z)}{\partial B_i}$$

D'après l'expression de  $\ln Z$ , il vient:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\ln Z)}{\partial B_i} &= -\frac{\beta}{2} \sum_j J_{ij}^{-1} B_j - \frac{\beta}{2} \sum_j B_j J_{ji}^{-1} + \sum_j J_{ij}^{-1} \bar{\varphi}_j \\ &= -\beta \sum_j J_{ij}^{-1} B_j + \sum_j J_{ij}^{-1} \bar{\varphi}_j \end{aligned}$$

Sous forme vectorielle, on a donc:

$$m = -J^{-1}B + \frac{1}{\beta}J^{-1}\bar{\varphi}$$

ou encore

$$B = -Jm + \frac{1}{\beta}\bar{\varphi}$$

Mais au point col, on a:

$$\frac{1}{\beta}J^{-1}\bar{\varphi} - J^{-1}B = \tanh \bar{\varphi},$$

Ainsi,

$$m = \tanh \bar{\varphi}$$

et

$$B = -Jm + \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} m$$

$$\Rightarrow \boxed{B_i = \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} m_i - \sum_j J_{ij} m_j}.$$

On retrouve bien les équations de champ moyen.

Pour aller plus loin, la première étape consiste à calculer le déterminant de la matrice dont les coefficients définissent la forme quadratique correspondant aux corrections du second ordre dans un développement de  $S$  autour de  $\bar{\varphi}$ . Ceci peut se faire directement sur la forme discrète de  $S$ , mais il est instructif de prendre la limite continue pour plusieurs raisons :

- D'après l'analyse de la solution champ moyen, ce sont les fluctuations à  $q$  petit qui dominent près de  $T_c$ . Une approximation continue est donc justifiée.

- Le modèle continu a des propriétés universelles : on peut démontrer que les exposants critiques ne dépendent que de considérations générales (symétries, nombre de composantes du paramètre d'ordre). En étudiant directement le modèle continu, on étudie directement toute une classe de modèles.
- C'est sous la forme continue que le lien avec la théorie quantique des champs deviendra évident.

Il faut donc déterminer la version continue, en champ nul, de  $S$  donnée par

$$S(\{\varphi_i\}) = \frac{1}{2\beta} \sum_{i,j} J_{ij}^{-1} \varphi_i \varphi_j - \sum_i \ln \cosh \varphi_i - N \ln 2.$$

La constante est sans importance, et on s'intéresse à une région où  $\varphi_i$  est petit (on considère les petites fluctuations autour de  $\bar{\varphi}$ , et  $\bar{\varphi} = 0$  pour  $T > T_0$ ).

$$\begin{aligned} \ln \cosh x &= \ln \left( 1 + \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + \dots \right) \\ &= \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} - \frac{1}{2} \left( \frac{x^2}{2} + \dots \right)^2 + \dots \\ &\simeq \frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{12} \\ \Rightarrow - \sum_i \ln \cosh \varphi_i &\simeq -\frac{1}{2} \sum_i \varphi_i^2 + \frac{1}{12} \sum_i \varphi_i^4. \end{aligned}$$

Par ailleurs,

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} (J^{-1})_{ij} \varphi_i \varphi_j &= \frac{1}{N} \sum_{q_1 q_2} \sum_{i,j} (J^{-1})_{ij} e^{iq_1 r_i} e^{-iq_2 r_j} \varphi_{q_1} \varphi_{-q_2} \\ &= \sum_{qq_1 q_2} \left( \tilde{J}^{-1} \right) (q) \varphi_{q_1} \varphi_{-q_2} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(q_1 - q) r_i} \frac{1}{N} \sum_j e^{i(q - q_2) r_j} \\ &= \sum_q \left( \tilde{J}^{-1} \right) (q) \varphi_q \varphi_{-q} \end{aligned}$$

Mais

$$\begin{aligned}
\tilde{J}(q) &= 2J \sum_{\alpha=1}^D \cos q_{\alpha} \\
&\simeq 2J \sum_{\alpha=1}^D \left(1 - \frac{q_{\alpha}^2}{2}\right) \simeq T_0 - Jq^2 \\
\Rightarrow \quad \tilde{J}^{-1}(q) &= \frac{1}{T_0 - Jq^2} = \frac{1}{T_0} \left( \frac{1}{1 - \frac{Jq^2}{T_0}} \right) \\
&\simeq \frac{1}{T_0} \left( 1 + \frac{Jq^2}{T_0} \right) \\
\Rightarrow \quad \sum_{i,j} (J^{-1})_{ij} \varphi_i \varphi_j &= \frac{1}{T_0} \sum_q \varphi_q \varphi_{-q} + \frac{J}{T_0^2} \sum_q q^2 \varphi_q \cdot \varphi_{-q} \\
&= \frac{1}{T_0} \sum_{i,j} \delta_{ij} \varphi_i \varphi_j + \frac{J}{T_0^2} \sum_{i,j} \delta_{ij} \vec{\nabla} \varphi_i \cdot \vec{\nabla} \varphi_j \\
&= \frac{1}{T_0} \sum_i \varphi_i^2 + \frac{J}{T_0^2} \sum_i \left| \vec{\nabla} \varphi_i \right|^2 \\
\Rightarrow \quad S(\varphi_i) &= \frac{1}{2} \frac{T}{T_0} \sum_i \varphi_i^2 + \frac{1}{2} \frac{JT}{T_0^2} \sum_i \left| \vec{\nabla} \varphi_i \right|^2 - \frac{1}{2} \sum_i \varphi_i^2 + \frac{1}{12} \sum_i \varphi_i^4,
\end{aligned}$$

soit

$$S(\varphi_i) = \frac{JT}{2T_0^2} \sum_i \left| \vec{\nabla} \varphi_i \right|^2 + \frac{1}{2T_0} (T - T_0) \sum_i \varphi_i^2 + \frac{1}{12} \sum_i \varphi_i^4.$$

Si on définit  $\phi_i = \sqrt{\frac{JT}{T_0^2}} \varphi_i \Rightarrow \varphi_i = \sqrt{\frac{T_0^2}{JT}} \phi_i$ , cela s'écrit

$$S(\phi_i) = \frac{1}{2} \sum_i \left| \vec{\nabla} \phi_i \right|^2 + \frac{1}{2} \frac{T_0}{JT} (T - T_0) \sum_i \phi_i^2 + \frac{1}{12} \frac{T_0^4}{J^2 T^2} \sum_i \phi_i^4.$$

On peut remplacer la somme par une intégrale:

$$S[\phi] = \int d\vec{r} \left[ \frac{1}{2} \left| \vec{\nabla} \phi \right|^2 + \frac{1}{2} r_0(T) \phi^2 + \frac{1}{4} u_0(T) \phi^4 \right]$$

avec

$$\begin{cases} r_0(T) = \bar{r}_0(T - T_0), & \bar{r}_0 = \frac{T_0}{JT} \\ u_0(T) = \frac{T_0^4}{3J^2 T^2} \end{cases}$$

A un facteur multiplicatif sans importance près, la fonction de partition s'écrit:

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]}.$$



C'est le modèle dit de Landau-Ginsburg<sup>1</sup>.

### 3.4 Modèle de Landau-Ginsburg

Le modèle de Landau-Ginsburg est *défini* par la fonction de partition

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]}$$

avec

$$S[\Phi] = \int d\vec{r} \left[ \frac{1}{2} |\vec{\nabla}\phi|^2 + \frac{r_0}{2} \phi^2 + \frac{u_0}{4} \phi^4 - B(\vec{r})\phi(\vec{r}) \right] \quad (3.2)$$

où  $r_0 = \bar{r}_0(T - T_0)$ , et où on a ajouté un terme de source  $\int d\vec{r} B(\vec{r})\phi(\vec{r})$  à l'action par commodité<sup>2</sup>.

Lorsque  $\phi$  est un scalaire, comme dans le cas du modèle d'Ising, ce modèle décrit de façon générale les transitions de phase du second ordre dans les systèmes où le paramètre d'ordre a une seule composante. Ce modèle peut être généralisé à des paramètres d'ordre plus compliqués avec des conséquences non triviales.

Si  $u_0 = 0$ , on parle de *modèle gaussien*. Ce modèle n'est défini que pour  $r_0 > 0$  (i.e.  $T > T_0$ ).

Pour se familiariser avec la formulation continue, il est utile de refaire l'équivalent du champ moyen. Dans ce contexte, cette approximation s'appelle l'*approximation de Landau*.

Cette approximation consiste à chercher le champ qui minimise  $S[\phi]$ , et qui doit donc satisfaire la condition:

$$\frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(\vec{r})} = 0$$

avec

$$S[\Phi] = \int d\vec{r} \left[ \frac{1}{2} |\vec{\nabla}\phi|^2 + \frac{1}{2} r_0 \phi^2 + \frac{u_0}{4} \phi^4 - B(\vec{r})\phi(\vec{r}) \right].$$

---

<sup>1</sup>Certains auteurs écrivent le terme en  $\phi^4$  avec un coefficient  $\frac{u_0}{4!}$

<sup>2</sup>Le terme de source n'est pas vraiment un champ magnétique. C'est un intermédiaire de calcul qui permet de calculer les fonctions de corrélation de la théorie. De même,  $B_i$  n'est pas un champ physique. Il permet simplement de calculer  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ .

L'équation s'obtient par une généralisation triviale du cas unidimensionnel :

$$\begin{aligned} F[f] &= \int dx G(f(x)) \Rightarrow \frac{\delta F[f]}{\delta f(y)} = \int dx G'(f(x)) \delta(x-y) = G'(f(y)) \\ F[f] &= \int dx G(f'(x)) \Rightarrow \frac{\delta F[f]}{\delta f(y)} = \int dx G'(f'(x)) \delta'(x-y) = -G''(f'(y)) f''(y) \end{aligned}$$

Ainsi

$$\Rightarrow \frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(\vec{r})} = -\Delta \phi + r_0 \phi + u_0 \phi^3 - B(\vec{r}) = 0$$

soit

$$\boxed{-\Delta \phi + r_0 \phi + u_0 \phi^3 = B(\vec{r})}.$$

Soit  $\phi_0$  la solution de cette équation. L'approximation de Landau consiste à poser  $Z = \exp(-S[\Phi_0])$ . Essayons de déterminer le potentiel de Gibbs à cette approximation. Dans ce contexte, l'aimantation est *définie* par

$$M(\vec{r}) = \frac{\delta \ln Z[B]}{\delta B(\vec{r})} = -\frac{\delta S[B]}{\delta B(\vec{r})} = \Phi_0(\vec{r})$$

(le facteur  $\frac{1}{\beta}$  a été inclus dans le champ lorsqu'on a introduit le terme de source - c'est la convention habituelle<sup>3</sup>)

$$\Gamma[M(\vec{r})] = F[B[M(\vec{r})]] + \int d\vec{r} B(\vec{r}) M(\vec{r}).$$

Mais à cette approximation  $F = S[\Phi_0]$

$$\Rightarrow \Gamma[M(\vec{r})] = \int d\vec{r} \left[ \frac{1}{2} |\vec{\nabla} M|^2 + \frac{1}{2} r_0 M^2 + \frac{u_0}{4} M^4 \right].$$

Cette équation est la version continue de l'équation donnant  $\Gamma(\beta, \{m_i\})$  dans le cas du modèle sur réseau.

Dans le cas uniforme, on peut écrire le potentiel de Gibbs par unité de volume sous la forme:

$$\gamma \equiv \frac{\Gamma}{V} = \frac{1}{2} r_0 m^2 + \frac{u_0}{4} m^4 \quad (\text{champ moyen}).$$

---

<sup>3</sup>Cette relation est à rapprocher de  $m_i = \tanh \bar{\phi}_i$ . Comme  $\tanh \bar{\phi}_i = \bar{\phi}_i - \frac{\bar{\phi}_i^3}{2}$ , on peut montrer que cette différence est sans importance pour les quantités que nous calculons. En réalité, c'est clair puisque  $\Gamma[M(\vec{r})]$  est bien la version continue de  $\Gamma(\beta, \{m_i\})$ .

Pour aller à l'ordre suivant, il faut faire un développement de  $S[\phi]$  au second ordre autour de  $\phi_0$ :

$$\begin{aligned} S[\phi_0 + \eta] &= S[\phi_0] + \int d\vec{r} \eta(\vec{r}) \underbrace{\frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(\vec{r})}}_{=0} \Big|_{\phi=\phi_0} \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \eta(\vec{r}_1) \eta(\vec{r}_2) \frac{\delta^2 S[\phi]}{\delta \phi(\vec{r}_1) \delta \phi(\vec{r}_2)} \Big|_{\phi=\phi_0} \end{aligned}$$

et il faut calculer

$$\int \mathcal{D}\eta \exp \left[ -\frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \eta(\vec{r}_1) \eta(\vec{r}_2) \frac{\delta^2 S[\phi]}{\delta \phi(\vec{r}_1) \delta \phi(\vec{r}_2)} \Big|_{\phi=\phi_0} \right].$$

Ecrivons

$$\begin{aligned} S[\phi] &= S_1[\phi] + S_2[\phi] + S_3[\phi] - \int d\vec{r} B(\vec{r}) \phi(\vec{r}), \\ S_1[\phi] &= \int d\vec{r} \frac{1}{2} |\vec{\nabla} \phi|^2 \\ S_2[\phi] &= \int d\vec{r} \frac{r_0}{2} \phi^2 \\ S_3[\phi] &= \int d\vec{r} \frac{u_0}{4} \phi^4. \end{aligned}$$

Le dernier terme ne contribue pas à la dérivée seconde. Calculons les dérivées secondes des autres termes.

Pour simplifier, supposons qu'on soit à une dimension.

$$S_1[\phi] = \frac{1}{2} \int dx [\phi'(x)]^2.$$

$$\begin{aligned} \bullet \quad \frac{\delta S_1[\phi]}{\delta \phi(x_1)} &= \int dx \phi'(x) \delta'(x - x_1) \\ \frac{\delta^2 S_1[\phi]}{\delta \phi(x_1) \delta \phi(x_2)} &= \int dx \delta'(x - x_1) \delta'(x - x_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int dx_1 \int dx_2 \eta(x_1) \eta(x_2) \frac{\delta^2 S_1[\phi]}{\delta \phi(x_1) \delta \phi(x_2)} &= \int dx \eta'(x)^2 \\ &= - \int dx \eta(x) \eta''(x). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \bullet \quad \frac{\delta S_2[\phi]}{\delta \phi(x_1)} = r_0 \int dx \phi(x) \delta(x - x_1) \\
& \frac{\delta^2 S_2[\phi]}{\delta \phi(x_1) \delta \phi(x_2)} = r_0 \int dx \delta(x - x_1) \delta(x - x_2) \\
& \Rightarrow \int dx_1 \int dx_2 \eta(x_1) \eta(x_2) \frac{\delta^2 S_2[\phi]}{\delta \phi(x_1) \delta \phi(x_2)} = r_0 \int dx \eta(x)^2. \\
& \bullet \quad \left. \frac{\delta^2 S_3[\phi]}{\delta \phi(x_1) \delta \phi(x_2)} \right|_{\phi=\phi_0} = 3u_0 \int dx \phi_0^2(x) \delta(x - x_1) \delta(x - x_2) \\
& \Rightarrow \int dx_1 \int dx_2 \eta(x_1) \eta(x_2) \frac{\delta^2 S_3[\phi]}{\delta \phi(x_1) \delta \phi(x_2)} = 3u_0 \int dx \phi_0^2(x) \eta(x)^2.
\end{aligned}$$

Finalement, il faut calculer

$$\int \mathcal{D}\eta \exp \left[ -\frac{1}{2} \int d\vec{r} (-\eta \Delta \eta + r_0 \eta^2 + 3u_0 \phi_0^2 \eta^2) \right].$$

Supposons toujours  $\phi_0$  uniforme. C'est l'analogie en trois dimensions du problème de l'oscillateur harmonique avec des conditions aux bords non limitées.

Pour calculer cette intégrale fonctionnelle, il faut en principe considérer une version discrète, calculer l'intégrale multiple, puis prendre la limite continue. Il serait plus logique de faire ce calcul avant de prendre la limite continue du modèle sur réseau, ce qui est bien sûr faisable.

Néanmoins, la forme précise du préfacteur n'a aucune signification physique (on ne change pas la physique en multipliant la fonction de partition par une constante), et il nous suffit de connaître la dépendance fonctionnelle du résultat sur les paramètres  $r_0$ ,  $u_0$  et  $\phi_0^2$ .

Or, si on passe sur le réseau, elle est donnée par  $(\det A)^{-1/2}$ , où  $A$  est la matrice décrivant l'exposant. Mais  $\det A$  = le produit des valeurs propres. Il suffit donc de connaître les valeurs propres de l'opérateur

$$A = -\Delta + r_0 + 3u_0 \Phi_0^2.$$

Or, cet opérateur est diagonalisé par transformée de fourier, la valeur propre associée à  $\vec{q}$  étant  $q^2 + r_0 + 3u_0 \phi_0^2$ . En effet,

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} &= i\vec{q} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\
\Delta e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} &= i\vec{q} \vec{\nabla} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} = -q^2 e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\
\Rightarrow \det A &= \prod_{\vec{q}} (q^2 + r_0 + 3u_0 \phi_0^2).
\end{aligned}$$

On en déduit

$$\ln Z = -S(\phi_0) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \ln (q^2 + r_0 + 3u_0\phi_0^2).$$

On a ainsi calculé la première correction à l'énergie libre<sup>4</sup>.

Pour faire le lien avec l'approximation de Landau, il est utile de calculer le potentiel thermodynamique au même ordre. Commençons par exprimer l'énergie libre par site, toujours avec  $\phi_0$  uniforme:

$$\begin{aligned} f &= \frac{1}{2}r_0\phi_0^2 + \frac{u_0}{4}\phi_0^4 - B\phi_0 \\ &\quad + \frac{1}{2} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \ln (q^2 + r_0 + 3u_0\phi_0^2) \\ m &= -\frac{\partial f}{\partial B} = \phi_0 + \frac{\partial \phi_0}{\partial B} \underbrace{(B - r_0\phi_0 - u_0\phi_0^3)}_{=0} \\ &\quad - \frac{\partial \phi_0}{\partial B} \times 6u_0\phi_0 \frac{1}{2} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + r_0 + 3u_0\phi_0^2} \\ &= \phi_0 - \delta m \quad \text{avec } \delta m \equiv \phi_0 - m. \\ \Rightarrow \quad \phi_0 &= m + \delta m. \end{aligned}$$

Le potentiel de Gibbs par site  $\gamma$  est donné par:

$$\begin{aligned} \gamma = f + Bm &= \frac{1}{2}r_0(m + \delta m)^2 + \frac{1}{4}u_0(m + \delta m)^4 \\ &\quad - B\delta m + \frac{1}{2} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \ln (q^2 + r_0 + 3u_0(m + \delta m)^2) \\ &= \frac{1}{2}r_0m^2 + \frac{u_0}{4}m^4 + \delta m \underbrace{(r_0m + u_0m^3 - B)}_{\simeq 0(O(\delta m))} \\ &\quad + \frac{1}{2} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \ln (q^2 + r_0 + 3u_0m^2), \end{aligned}$$

soit

$$\gamma = \underbrace{\frac{1}{2}r_0m^2 + \frac{u_0}{4}m^4}_{\text{Approximation de Landau}} + \frac{1}{2} \int \underbrace{\frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \ln(q^2 + r_0 + 3u_0m^2)}_{\text{Premier terme du développement en nombre de boucles}}$$

---

<sup>4</sup>Ce choix correspond à un choix de mesure  $\int \mathcal{D}\eta$  tel que le préfacteur soit égal à 1.

Pour étudier le système à cet ordre, il suffit de calculer  $\chi^{-1} = \frac{\partial^2 \gamma}{\partial m^2} \Big|_{m=0}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \gamma}{\partial m} &= r_0 m + u_0 m^3 + 3u_0 m \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + r_0 + 3u_0 m^2} \\ \frac{\partial^2 \gamma}{\partial m^2} \Big|_{m=0} &= r_0 + 3u_0 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + r_0(T)} \end{aligned}$$

La température critique  $T_c$  est donnée par  $\chi^{-1} = 0$ , soit

$$\bar{r}_0(T_c - T_0) + 3u_0 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + \bar{r}_0(T_c - T_0)} = 0,$$

soit

$$T_c = T_0 - \frac{3u_0}{\bar{r}_0} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + \bar{r}_0(T_c - T_0)}.$$

Cette approximation n'a de justification que si  $T_c - T_0$  est petit, auquel cas on peut négliger  $\bar{r}(T_c - T_0)$  au dénominateur, ce qui donne

$$\boxed{T_c = T_0 - \frac{3u_0}{\bar{r}_0} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2}}.$$

La température critique est abaissée par les fluctuations.

Etudions par ailleurs le comportement de  $\chi^{-1}$  près de  $T_c$ .

$$\begin{aligned} \chi^{-1} &= \bar{r}_0(T - T_0) + 3u_0 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + \bar{r}_0(T - T_0)} \\ &= \bar{r}_0(T - T_c) + \underbrace{\bar{r}_0(T_c - T_0)}_{=-3u_0 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2}} + 3u_0 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + \underbrace{\bar{r}_0(T - T_0)}_{\simeq \chi^{-1}}} \\ \Rightarrow \chi^{-1} &= \bar{r}_0(T - T_c) + 3u_0 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \left( \frac{1}{q^2 + \chi^{-1}} - \frac{1}{q^2} \right). \end{aligned}$$

Mais

$$\begin{aligned} \frac{1}{q^2 + \chi^{-1}} - \frac{1}{q^2} &= \frac{1}{q^2 \left( 1 + \frac{\chi^{-1}}{q^2} \right)} - \frac{1}{q^2} \\ &\simeq \frac{1}{q^2} \left( 1 - \frac{\chi^{-1}}{q^2} \right) - \frac{1}{q^2} = -\frac{\chi^{-1}}{q^4} \end{aligned}$$

d'où

$$\chi^{-1} = \bar{r}_0(T - T_c) - 3u_0 \chi^{-1} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^4}.$$

Le comportement de l'intégrale dépend de la dimensionnalité.

$D > 4$  : l'intégrale converge. Posons

$$\begin{aligned} C &= 3u_0 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^4} \\ \Rightarrow \chi^{-1} &= \frac{\bar{r}_0}{1+C} (T - T_c) \\ \Rightarrow \chi &= \frac{1+C}{\bar{r}_0} (T - T_c)^{-1}. \end{aligned}$$

L'exposant critique  $\gamma$  est toujours égal à 1. On peut démontrer que cela reste vrai si on pousse le développement aux ordres suivants. On résume en général cette situation en disant que le champ moyen est exact en dimension supérieure à 4. En fait,  $T_c$  est modifiée par les fluctuations, mais pas les exposants critiques.

$D \leq 4$  : cette intégrale diverge. Si on veut étudier le comportement tout près de  $T_c$ , on ne peut pas se limiter à cet ordre. La technique appropriée, le groupe de renormalisation, sort du cadre de ce cours.

Si l'on se limite à des températures pas trop proches de  $T_c$ , cette approximation reste néanmoins valable.

Pour déterminer la limite de validité, revenons à l'équation

$$\begin{aligned} \chi^{-1} &= \bar{r}_0(T - T_c) + 3u_0 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \left( \frac{1}{q^2 + \chi^{-1}} - \frac{1}{q^2} \right) \\ &= \bar{r}_0(T - T_c) + 3u_0 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \left( \frac{-\chi^{-1}}{q^2(q^2 + \chi^{-1})} \right) \\ &\simeq \bar{r}_0(T - T_c) \left( 1 - 3u_0 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2(q^2 + \chi^{-1})} \right). \end{aligned}$$

Dans cette intégrale, il faut traiter séparément  $q < \sqrt{\chi^{-1}}$  et  $q > \sqrt{\chi^{-1}}$

$$\begin{aligned} q < \sqrt{\chi^{-1}} : I_1 &\propto \int_0^{\sqrt{\chi^{-1}}} \frac{q^{D-1} dq}{(2\pi)^D q^2}, \quad \text{converge si } D > 2 \\ q > \sqrt{\chi^{-1}} : I_2 &\propto \int_{\sqrt{\chi^{-1}}}^{+\infty} \frac{q^{D-1} dq}{(2\pi)^D q^4} \\ &\propto [q^{D-4}]_{\sqrt{\chi^{-1}}}^{+\infty} \propto (\chi^{-1})^{\frac{D}{2}-2}. \end{aligned}$$

L'approximation reste valable tant que le terme correctif est beaucoup plus petit que le premier, soit tant que :

$$u_0 (\bar{r}_0(T - T_c))^{\frac{D}{2}-2} \ll 1.$$

C'est le critère de Ginsburg.

*Remarque:* l'analogie avec la théorie quantique des champs est évidente. En théorie des champs, c'est directement le champ  $\phi$  qui a une signification. On n'a pas besoin de faire de transformation de Legendre (masse  $m \Leftrightarrow 1/\xi$  longueur de corrélation).



# Chapitre 4

## Intégrale de chemin et problème à $N$ -corps

### 4.1 Introduction

L'objet central du problème à  $N$ -corps est de calculer la fonction de partition

$$Z = \text{Tr} e^{\beta H} = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle.$$

Pour obtenir une représentation en termes d'intégrale de chemin, il suffit, comme dans le cas à une particule, d'utiliser la formule de Trotter et d'introduire une base continue à chaque étape. Le choix qui peut sembler le plus naturel consiste à utiliser les fonctions symétrisées ou antisymétrisées (bosons ou fermions) construites à partir des fonctions propres de  $\hat{x}_i$  et  $\hat{p}_i$ . Cette représentation s'avère utile dans certains cas si l'on veut essayer d'évaluer  $Z$  numériquement en utilisant par exemple une méthode de type Monte Carlo. On peut montrer que l'on arrive à une expression du type

$$\begin{aligned} Z = & \frac{1}{N!} \sum_P \xi^P \int dx_1 \dots dx_N \int_{\substack{x_1(\beta) = x_{P_1}(0) = x_1 \\ \vdots \\ x_N(\beta) = x_{P_N}(0) = x_N}} \mathcal{D}x_1 \dots \mathcal{D}x_N \\ & \times \exp \left[ - \int_0^\beta d\tau \sum_{i=1}^N \frac{m}{2} \left( \frac{dx_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(x_i(\tau) - x_j(\tau)) \right] \end{aligned}$$

pour un hamiltonien du type

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\hat{x}_i - \hat{x}_j).$$

La somme sur  $P$  est la somme sur toutes les permutations des indices  $i = 1, \dots, N$ ,  $\xi = +1$  pour les bosons et  $-1$  pour les fermions, et  $P$  est la parité de la permutation.

Cette représentation ne se prête pas simplement à des développements analytiques à cause de la somme sur les permutations. Cette difficulté vient directement de l'indiscernabilité des particules qui oblige à travailler avec des fonctions totalement symétriques ou totalement antisymétriques.

Pour arriver à une expression donnant lieu à des développements analytiques intéressants, il est naturel d'essayer d'utiliser la base de Fock. Mais la base de Fock est définie à l'aide de variables discrètes : les nombres d'occupation. Pour obtenir une représentation en termes d'intégrale de chemin, il est utile d'introduire une base continue dans l'espace de Fock, la base des états cohérents.

## 4.2 Etats cohérents : bosons

La construction des états cohérents ne se fait pas de la même façon pour les bosons et les fermions. Dans cette section, on s'intéresse aux bosons. Commençons par le cas le plus simple, celui d'un oscillateur harmonique, et rappelons les propriétés des états cohérents.

L'oscillateur harmonique est défini par l'hamiltonien

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2.$$

Il est possible de réécrire cet hamiltonien à l'aide d'opérateurs  $a$ ,  $a^+$  définis par :

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p \right] \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q - i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p \right]. \end{aligned}$$

On vérifie que  $[a, a^+] = 1$ .

*Démonstration :*

$$\begin{aligned} [a, a^+] &= \frac{1}{2} \left( -\frac{i}{\hbar}[q, p] + \frac{i}{\hbar}[p, q] \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar}[q, p] = 1. \end{aligned}$$

A l'aide de ces opérateurs, le hamiltonien s'écrit :

$$H = \hbar\omega \left( a^+a + \frac{1}{2} \right).$$

*Démonstration :*

$$\begin{aligned} \begin{cases} q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+) \\ p = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^+ - a) \end{cases} \\ \Rightarrow \frac{p^2}{2m} + \frac{m^2\omega^2}{2}q^2 = -\frac{m\omega\hbar}{4m}(a^2 + a^{+2} - aa^+ - a^+a) \\ \quad + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega}(a^2 + a^{+2} + aa^+ + a^+a) \\ = \hbar\omega \left( a^+a + \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

- Les valeurs propres de  $a^+a$  sont positives ou nulles car si  $a^+a|\varphi_n\rangle = \alpha_n|\varphi_n\rangle$ ,

$$\langle \varphi_n | a^+a | \varphi_n \rangle = \alpha_n = \|a|\varphi_n\rangle\|^2 \geq 0.$$

- Si  $|\varphi_n\rangle$  est vecteur propre avec  $\alpha_n$  comme valeur propre,  $a|\varphi_n\rangle$  est vecteur propre avec  $\alpha_n - 1$  comme valeur propre.

*Démonstration :*

$$\begin{aligned} a^+aa|\varphi_n\rangle &= (-1 + aa^+)a|\varphi_n\rangle \\ &= -a|\varphi_n\rangle + a\alpha_n|\varphi_n\rangle \end{aligned}$$

Pour ne pas générer d'états propres de valeur propre négative, il faut que le spectre soit entier pour que l'application successive de  $a$  annule l'état de départ. On appelle  $|0\rangle$  l'état de valeur propre 0 pour l'opérateur  $a^+a$ .

**Définition:** Les états cohérents sont les états propres de l'opérateur  $a$ .

Démontrons que  $e^{za^+}|0\rangle$  est un état propre de  $a$ , et calculons sa valeur propre.

$$ae^{za^+}|0\rangle = a \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} (a^+)^n |0\rangle.$$

Or,

$$[a, (a^+)^n] = [a, (a^+)^{n-1}] a^+ + (a^+)^{n-1} = n(a^+)^{n-1}$$

(se démontre par récurrence).

$$\begin{aligned} \Rightarrow a(a^+)^n|0\rangle &= \underbrace{(a^+)^n a |0\rangle}_{=0} + n(a^+)^{n-1}|0\rangle \\ \Rightarrow ae^{za^+}|0\rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{(n-1)!} (a^+)^{n-1} |0\rangle = ze^{za^+}|0\rangle \end{aligned}$$

(dans la somme,  $n = 0$  donne 0 car  $a|0\rangle = 0$ ). Ainsi,  $|z\rangle \equiv e^{za^+}|0\rangle$  est vecteur propre de  $a$  avec la valeur propre  $z$ . Par ailleurs,

$$a|z\rangle = z|z\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle z|a^+ = \langle z|z^*.$$

**Relation de fermeture:** À l'aide de ces états cohérents, qui constituent une base surcomplète, on peut démontrer la relation de fermeture suivante :

$$\int \frac{dz^* dz}{2i\pi} e^{-z^* z} |z\rangle \langle z| = 1$$

où la “mesure”  $\int \frac{dz^* dz}{2i\pi}$  est définie par  $\int \frac{d(\operatorname{Re} z) d(\operatorname{Im} z)}{\pi}$ .

*Démonstration :* soit  $|n\rangle$  la base orthonormée des états propres de  $a^+a$  ayant la valeur propre  $n$ . On a

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle.$$

En effet,

$$\begin{aligned} \langle 0|a^n (a^+)^n |0\rangle &= \langle 0|a^{n-1} (a (a^+)^n) |0\rangle \\ &= \langle 0|a^{n-1} (n(a^+)^{n-1} + \underbrace{(a^+)^n a}_{\rightarrow 0}) |0\rangle \\ &= n \langle 0|a^{n-1} (a^+)^{n-1} |0\rangle = n! \quad \text{par récurrence.} \end{aligned}$$

On peut donc écrire

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

et

$$\langle z| = \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{z^{*m}}{\sqrt{m!}} \langle m|.$$

Ainsi

$$\int \frac{dz^* dz}{2i\pi} e^{-z^* z} |z\rangle \langle z| = \int \frac{d(\operatorname{Re} z) d(\operatorname{Im} z)}{\pi} e^{-z^* z} \sum_{m,n} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \frac{z^{*m}}{\sqrt{m!}} |n\rangle \langle m|.$$

Passons en coordonnées polaires :  $z = re^{i\theta}$

$$\int \frac{dz^* dz}{2i\pi} e^{-z^* z} |z\rangle \langle z| = \int \frac{r dr d\theta}{\pi} e^{-r^2} \sum_{m,n} \frac{r^n e^{i\theta n} r^m e^{-i\theta m}}{\sqrt{n!} \sqrt{m!}} |n\rangle \langle m|.$$

Mais

$$\int d\theta e^{i\theta(n-m)} = 2\pi \delta_{m,n},$$

d'où

$$\int \frac{dz^* dz}{2i\pi} e^{-z^* z} |z\rangle \langle z| = \int 2r dr \sum_n \frac{e^{-r^2} r^{2n}}{n!} |n\rangle \langle n|.$$

Il reste à calculer

$$\begin{aligned} I_n &= \int 2r^{2n+1} e^{-r^2} dr \\ &= \int du u^n e^{-u} \quad (u = r^2) \\ \int_0^{+\infty} du u^n e^{-u} &= - \int du (-e^{-u}) n u^{n-1} + \underbrace{[-e^{-u} u^n]_0^{+\infty}}_{=0} \\ &= n I_{n-1} = n! \\ \Rightarrow \int \frac{dz^* dz}{2i\pi} e^{-z^* z} |z\rangle \langle z| &= \sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1} \end{aligned}$$

c.q.f.d.

**Produit scalaire:** Les états cohérents ne sont pas orthogonaux. Leur produit scalaire est donné par  $\langle z_2 | z_1 \rangle = e^{z_2^* z_1}$ .

*Démonstration :*

$$\begin{aligned} \langle z_2 | z_1 \rangle &= \sum_{m,n} \frac{(z_2^*)^m}{\sqrt{m!}} \underbrace{\langle m | n \rangle}_{\delta_{mn}} \frac{z_1^n}{\sqrt{n!}} \\ &= \sum_n \frac{(z_2^*)^n z_1^n}{n!} = e^{z_2^* z_1}. \end{aligned}$$

### Fonction de partition :

Considérons désormais un système décrit par un hamiltonien qui est un polynôme en  $a^+, a$ . Le but est de calculer sa fonction de partition exprimée sous la forme:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \int \frac{dz dz^*}{2i\pi} e^{-zz^*} \langle z | e^{-\beta H} | z \rangle.$$

On est donc amené à calculer la valeur moyenne d'opérateurs entre des états cohérents. Or, ce calcul n'est simple que si les opérateurs sont dans l'ordre normal, c'est-à-dire si, dans chaque terme du polynôme, les opérateurs  $a$  sont à la droite des opérateurs  $a^+$ . Dans ce cas, on a en effet:

$$\langle z_2 | (a^+)^m a^n | z_1 \rangle = (z_2^*)^m z_1^n \langle z_2 | z_1 \rangle.$$

Par contre, si ce n'est pas le cas, il faut remettre les termes dans l'ordre normal en utilisant les relations de commutation. Mais même si le hamiltonien est dans l'ordre normal, son exponentielle ne l'est pas puisqu'elle fait intervenir les produits des différents termes du polynôme.

Pour résoudre ce problème, on utilise une variante de la formule de Trotter:

$$e^{-\beta H} = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left( \mathbb{1} - \frac{\beta H}{N} \right)^N,$$

et on introduit une relation de fermeture entre les différents facteurs, ce qui conduit à l'expression:

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \int \frac{dz dz^*}{2\pi i} e^{-zz^*} \int \frac{dz_{N-1} dz_{N-1}^*}{2\pi i} e^{-z_{N-1} z_{N-1}^*} \\ &\dots \int \frac{dz_1 dz_1^*}{2\pi i} e^{-z_1 z_1^*} \langle z | \mathbb{1} - \frac{\beta H}{N} | z_{N-1} \rangle \dots \langle z_1 | \mathbb{1} - \frac{\beta H}{N} | z \rangle \end{aligned} \quad (4.1)$$

On est donc ramené à l'évaluation de valeurs moyennes du type

$$\langle z_2 | \mathbb{1} - \frac{\beta H}{N} | z_1 \rangle$$

Or, si  $H$  est dans l'ordre normal, on a:

$$\langle z_2 | H(a^+, a) | z_1 \rangle = H(z_2^*, z_1) \langle z_2 | z_1 \rangle.$$

Ainsi,

$$\langle z_2 | \mathbb{1} - \frac{\beta H}{N} | z_1 \rangle = 1 - \frac{\beta H(z_2^*, z_1)}{N} \langle z_2 | z_1 \rangle \simeq e^{-\frac{\beta H(z_2^*, z_1)}{N}} \langle z_2 | z_1 \rangle.$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow Z &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \int \frac{dz dz^*}{2\pi i} \int \frac{dz_1 dz_1^*}{2\pi i} \dots \int \frac{dz_{N-1} dz_{N-1}^*}{2\pi i} e^{-zz^*} e^{-z_1 z_1^*} \dots e^{-z_{N-1} z_{N-1}^*} \\ &\quad \times e^{z_{N-1} z^*} \dots e^{z_1 z_2^*} e^{z z_1^*} \\ &\quad \times e^{-\frac{\beta}{N} [H(z^*, z_{N-1}) + \dots + H(z_2^*, z_1) + H(z_1^*, z)]} \\ &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \prod_{k=1}^N \int \frac{dz_k dz_k^*}{2\pi i} e^{-S(z_1^*, z_1, \dots, z_N^*, z_N)} \end{aligned}$$

avec

$$S(z_1^*, \dots, z_N) = \sum_{k=1}^N \left( -z_{k-1} z_k^* + z_k z_k^* + \frac{\beta}{N} H(z_k^*, z_{k-1}) \right)$$

et  $z_0 \equiv z_N$ . Mais

$$\begin{aligned} z_k^* (z_k - z_{k-1}) &= \frac{\beta}{N} z_k^* \left( \frac{z_k - z_{k-1}}{\beta/N} \right) \\ &\rightarrow \frac{\beta}{N} z^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} z(\tau) \text{ quand } N \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Finalement, on peut introduire la notation suivante :

$$Z = \int_{z(\beta)=z(0)} \mathcal{D}z^* \mathcal{D}z \exp [-S[z^*, z]]$$

avec

$$S[z^*(\tau), z(\tau)] = \int_0^\beta \left[ z^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} z(\tau) + H(z^*(\tau), z(\tau)) \right] d\tau.$$

On a donc exprimé la fonction de partition comme une intégrale fonctionnelle. La mesure est définie par

$$\mathcal{D}z^* \mathcal{D}z \equiv \prod_{k=1}^N \frac{dz_k dz_k^*}{2i\pi} \equiv \prod_{k=1}^N \frac{d(\operatorname{Re} z_k) d(\operatorname{Im} z_k)}{\pi}.$$

La notation  $\prod_{k=1}^N \frac{dz_k dz_k^*}{2i\pi}$  vient d'une autre façon de voir les choses. On peut définir une intégrale de chemin sur l'espace des phases  $dq dp$ , puis faire un changement de variables

$$\begin{aligned} z &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip), & z^* &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip) \\ \frac{d(\operatorname{Re} z) d(\operatorname{Im} z)}{\pi} &= \frac{dp dq}{2\pi}. \end{aligned}$$

Or, si on considère  $z(p, q)$  et  $z^*(p, q)$  comme un changement de variables, on a :

$$\begin{aligned} dz dz^* &= dp dq \times \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial z}{\partial p} & \frac{\partial z}{\partial q} \\ \frac{\partial z^*}{\partial p} & \frac{\partial z^*}{\partial q} \end{array} \right| \\ &= dp dq \times \frac{1}{2} \left| \begin{array}{cc} i & 1 \\ -i & 1 \end{array} \right| = dp dq \times i \\ \rightarrow \quad \frac{dp dq}{2\pi} &= \frac{dz dz^*}{2i\pi}. \end{aligned}$$

Cette manipulation est purement formelle ! La définition est bien  $\int \frac{d(\operatorname{Re} z) d(\operatorname{Im} z)}{\pi}$ .

De même que l'intégrale gaussienne est l'élément de base pour le calcul des intégrales de chemin de Feynman, la formule de base pour l'intégrale de chemin des états cohérents est :

$$\int \prod_{i=1}^N \frac{dz_i^* dz_i}{2\pi i} e^{-\sum_{i,j} z_i^* H_{ij} z_j + J_i^* z_i + J_i z_i^*} = (\det H)^{-1} e^{\sum_{i,j} J_i^* H_{ij}^{-1} J_j},$$

où  $H$  est une matrice hermitienne positive (voir appendice mathématique).

*Exemple :* Calculons la fonction de partition de l'oscillateur harmonique.

$$Z = \lim_{N \rightarrow +\infty} \prod_{k=1}^N \int \frac{dz_k^* dz_k}{2i\pi} e^{-\sum_{i,j} z_i^* A_{ij} z_j} (e^{-\frac{\beta}{N} \frac{\hbar\omega}{2}})^N$$

avec

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & 0 & -a \\ & \ddots & & \\ & & 0 & \\ 0 & & & -a & 1 \end{pmatrix}$$

et  $a = 1 - \frac{\beta}{N} \hbar\omega$

Un développement du déterminant suivant la première ligne conduit à:

$$\det A = 1 + (-1)^{N-1}(-a)(-a)^{N-1} = 1 - a^N.$$

Mais

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \left(1 + \frac{x}{N}\right)^N = e^x$$

$$\text{Ainsi, } \lim_{N \rightarrow +\infty} \det A = 1 - e^{-\beta\hbar\omega}$$

$$\Rightarrow Z = \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{2 \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}.$$

c.q.f.d.

La généralisation au cas à  $N$  modes de bosons est immédiate. Si on part du vide de l'espace de Fock, les états cohérents sont définis par

$$e^{\sum_{\alpha} z_{\alpha} a_{\alpha}^+} |0\rangle$$

où  $\alpha$  est un nombre quantique qui décrit les fonctions sur la base desquelles l'espace de Fock est construit. Si on désigne par  $z$  le vecteur de composantes  $z_{\alpha}$ , on a :

$$a_{\alpha} |z\rangle = z_{\alpha} |z\rangle.$$

La fonction de partition s'écrit :

$$Z = \int_{z_{\alpha}(\beta) = z_{\alpha}(0)} \mathcal{D}z_{\alpha}^* \mathcal{D}z_{\alpha} \exp(-S[z^*, z]),$$



avec

$$S[z^*, z] = \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_\alpha z_\alpha^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} z_\alpha(\tau) + H(z_\alpha^*(\tau), z_\beta^*(\tau), z_\gamma^*(\tau), \dots, z_\alpha(\tau), z_\beta(\tau), z_\gamma(\tau), \dots) \right]$$

où  $H$  est dans l'ordre normal.

*Approximations :*

- Perturbations (si  $H = H_0 + V$ )
- Phase stationnaire (utile, mais mal contrôlé).

### 4.3 Intégrale de chemin et théorie de perturbations

Supposons que  $H = H_0 + V$ , où  $H_0$  est quadratique dans les opérateurs de bosons, et  $V$  est d'ordre supérieur. La fonction de partition s'écrit :

$$Z = \lim_{N \rightarrow +\infty} \prod_{k=1}^N \prod_\alpha \frac{dz_{\alpha k}^* dz_{\alpha k}}{2\pi i} e^{-S(\{z_{\alpha k}^*, z_{\alpha k}\})}$$

avec

$$S = \sum_{k=1}^N \left( \sum_\alpha (z_{\alpha k} z_{\alpha k}^* - z_{\alpha k-1} z_{\alpha k}^*) + \frac{\beta}{N} H_0(\{z_{\alpha k}^*, z_{\alpha k}\}) + \frac{\beta}{N} V(\{z_{\alpha k}^*, z_{\alpha k}\}) \right).$$

Dans une expression de ce type,  $V$  est simplement une fonction de variables complexes, et on peut donc écrire :

$$e^{-S(\{z_{\alpha k}^*, z_{\alpha k}\})} = e^{-S_0(\{z_{\alpha k}^*, z_{\alpha k}\})} e^{-\sum_{k=1}^N \frac{\beta}{N} V(\{z_{\alpha k}^*, z_{\alpha k}\})}.$$

Dans cette expression, on peut développer l'exponentielle de  $V$

$$\Rightarrow e^{-\sum_{k=1}^N \frac{\beta}{N} V(\{z_{\alpha k}^*, z_{\alpha k}\})} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left( \sum_{k=1}^N \frac{\beta}{N} V(\{z_{\alpha k}^*, z_{\alpha k}\}) \right)^n.$$

On arrive donc à une expression qui, pour  $N$  donné, est un développement en puissances de  $V$ . Par ailleurs, si  $H_0$  est quadratique,  $e^{-S_0}$  est de la forme  $e^{-\sum_{i,j} z_i^* M_{ij} z_j}$ , où on a regroupé les deux indices  $(\alpha, k)$  dans un même indice. Un terme d'ordre  $n$  du développement se ramène donc au calcul d'une intégrale du type

$$\int \mathcal{D}z^* \mathcal{D}z z_{i1} z_{i2} \dots z_{in} z_{jn}^* \dots z_{j1}^* e^{-\sum_{i,j} z_i^* M_{ij} z_j},$$

où les indices  $i_1, \dots, i_n, j_n, \dots, j_1$  sont ceux qui apparaissent dans la somme sur  $k$  élevée à la puissance  $n$ .

Or, ce calcul peut être effectué très simplement à l'aide du **théorème de Wick** qui stipule que :

$$\frac{\int \mathcal{D}z^* \mathcal{D}z z_{i1} z_{i2} \dots z_{in} z_{jn}^* \dots z_{j1}^* e^{-\sum_{i,j} z_i^* M_{ij} z_j}}{\int \mathcal{D}z^* \mathcal{D}z e^{-\sum_{i,j} z_i^* M_{ij} z_j}} = \sum_P M_{i_{P_n} j_n}^{-1} \dots M_{i_{P_1} j_1}^{-1}.$$

*Démonstration* : D'après le résultat de l'intégration sur les fonctions de variables complexes, on a :

$$G(J^*, J) \equiv \frac{\int \mathcal{D}z^* \mathcal{D}z e^{-\sum_{i,j} z_i^* M_{ij} z_j + \sum_i (J_i^* z_i + z_i^* J_i)}}{\int \mathcal{D}z^* \mathcal{D}z e^{-\sum_{i,j} z_i^* M_{ij} z_j}} = e^{\sum_{i,j} J_i^* M_{ij}^{-1} J_j}.$$

Si on dérive la première expression par rapport à  $J_{i1}^* J_{i2}^* \dots J_{jn}^* \dots J_1$ , il vient

$$\left. \frac{\partial^{2n} G}{\partial J_{i1}^* \dots \partial J_{j1}} \right|_{J=J^*=0} = \frac{\int \mathcal{D}z^* \mathcal{D}z z_{i1} z_{i2} \dots z_{in} z_{jn}^* \dots z_{j1}^* e^{-\sum_{i,j} z_i^* M_{ij} z_j}}{\int \mathcal{D}z^* \mathcal{D}z e^{-\sum_{i,j} z_i^* M_{ij} z_j}}.$$

Si on dérive la deuxième expression, il vient :

$$\left. \frac{\partial^{2n} G}{\partial J_{i1}^* \dots \partial J_{j1}} \right|_{J=J^*=0} = \left. \frac{\partial^n}{\partial J_{i1}^* \dots \partial J_{in}^*} \left[ \left( \sum_{k_n} J_{k_n}^* M_{k_n j_n}^{-1} \right) \dots \left( \sum_{k_1} J_{k_1}^* M_{k_1 j_1}^{-1} \right) \times e^{\sum_{i,j} J_i^* M_{ij}^{-1} J_j} \right] \right|_{J=J^*=0}.$$

Dans le calcul de cette dérivée, les termes obtenus en dérivant l'exponentielle sont nuls en  $J = J^* = 0$ . Par ailleurs, pour obtenir une contribution non nulle, il faut que

$$\begin{aligned} \{k_l, l = 1, \dots, n\} &= \{i_l, l = 1, \dots, n\} \\ \Rightarrow \frac{\int \mathcal{D}z^* \mathcal{D}z z_{i1} z_{i2} \dots z_{in} z_{jn}^* \dots z_{j1}^* e^{-\sum_{i,j} z_i^* M_{ij} z_j}}{\int \mathcal{D}z^* \mathcal{D}z e^{-\sum_{i,j} z_i^* M_{ij} z_j}} &= \sum_P M_{i_{P_n} j_n}^{-1} \dots M_{i_{P_1} j_1}^{-1}. \end{aligned}$$

c.q.f.d.

Le calcul des termes de la série de perturbation repose sur l'utilisation systématique de cette identité sur la version discrétisée des intégrales de chemin. Dans ce contexte, le théorème de Wick est une simple identité algébrique.

*Remarque:* On peut aussi faire une approximation de phase stationnaire. Si la solution qui minimise l'action correspond à  $z = z^* = 0$ , le développement asymptotique autour du col est équivalent au développement perturbatif. Par contre, si le minimum est à  $z, z^* \neq 0$ , l'approximation de phase stationnaire conduit à un autre développement, dit en nombre de boucles, et peut se révéler une approximation nettement meilleure.

## 4.4 Intégrale de chemin et fermions

La représentation de la fonction de partition et des fonctions de Green en termes d'intégrale de chemin peut être étendue au cas des fermions, mais il s'agit d'une extension non triviale. Ceci est dû au fait que les opérateurs création et annihilation anticommulent. Du coup, la construction des états cohérents n'est pas immédiate.

Considérons en effet un état cohérent de bosons  $|z\rangle$  et deux opérateurs destruction  $a_\alpha$  et  $a_\beta$ . On a :

$$\begin{cases} a_\alpha |z\rangle = z_\alpha |z\rangle \\ a_\beta |z\rangle = z_\beta |z\rangle \end{cases} \Rightarrow (a_\alpha a_\beta - a_\beta a_\alpha) |z\rangle = (z_\alpha z_\beta - z_\beta z_\alpha) |z\rangle.$$

D'après les règles de commutation des opérateurs création et annihilation de bosons, ceci doit donner 0, ce qui est compatible avec le fait que  $z_\alpha z_\beta = z_\beta z_\alpha$  pour  $z_\alpha, z_\beta \in \mathbb{C}$ .

Supposons qu'on réussisse à construire des états cohérents de fermions tels que  $a_\alpha |z\rangle = z_\alpha |z\rangle$ ,  $a_\beta |z\rangle = z_\beta |z\rangle$ . D'après les règles d'anticommutation, on doit avoir

$$\begin{aligned} (a_\alpha a_\beta + a_\beta a_\alpha) |z\rangle &= 0 \\ \Rightarrow z_\alpha z_\beta &= -z_\beta z_\alpha. \end{aligned}$$

Les coefficients  $z_\alpha, z_\beta$  ne peuvent être des nombres complexes. Ils doivent appartenir à une *algèbre de Grassman*.

### Algèbre de Grassman

Une algèbre de Grassman est définie par la donnée de  $n$  générateurs  $\psi_\alpha$ ,  $\alpha = 1, \dots, n$ .

- Ces générateurs anticommulent :  $\psi_\alpha \psi_\beta + \psi_\beta \psi_\alpha = 0$ .
- En particulier,  $\psi_\alpha^2 = 0$ .
- L'algèbre comprend les combinaisons linéaires à coefficients complexes de tous les polynômes de degré au plus égal à 1 dans une variable donnée.

- Si le nombre de générateurs  $n = 2p$  est pair, on peut définir la conjugaison par une bijection d'un sous-ensemble de  $p$  générateurs vers le sous-ensemble des  $p$  restants. Le conjugué d'un générateur  $\psi_\alpha$  est noté  $\bar{\psi}_\alpha$ .
- Si  $a$  est un nombre complexe,  $\overline{(a\psi)} = a^*\bar{\psi}$ .
- $\overline{\psi_1\psi_2} \equiv \bar{\psi}_2\bar{\psi}_1$ .
- On définit de façon *formelle* l'intégration par :

$$\begin{aligned} \int d\psi &= 0 & \int d\bar{\psi} &= 0 \\ \int d\psi \psi &= 1 & \int d\bar{\psi} \bar{\psi} &= 1. \end{aligned}$$

- Pour un polynôme de degré  $> 1$ , il faut anticommuter les variables pour ramener chaque variable  $\psi_\alpha$  au contact de  $d\psi_\alpha$ .

$$\text{Exemple :} \quad \int d\psi_1 d\psi_2 \psi_2 \psi_3 \psi_1 = \int d\psi_1 \psi_3 \psi_1 = -\psi_3.$$

### Etats cohérents

Pour construire un état cohérent de fermions, on associe à chaque  $a_\alpha$  un générateur  $\psi_\alpha$  et à  $a_\alpha^+$  le conjugué  $\bar{\psi}_\alpha$ . L'espace de Fock généralisé contient les combinaisons linéaires d'états de l'espace de Fock avec des coefficients dans l'algèbre de Grassman associée à ces générateurs.

On impose que les variables de Grassman et les opérateurs  $a, a^+$  anticommutent, et on définit la conjugaison du produit par

$$(\psi a)^+ = a^+ \bar{\psi}.$$

Par analogie avec le cas des bosons, on définit

$$|\psi\rangle = e^{-\sum_\alpha \psi_\alpha a_\alpha^+} |0\rangle.$$

### Proposition 4.1.

$$|\psi\rangle = \prod_\alpha (1 - \psi_\alpha a_\alpha^+) |0\rangle.$$

*Démonstration :*  $e^{-\psi_\alpha a_\alpha^+} = 1 - \psi_\alpha a_\alpha^+$  puisque les termes d'ordre supérieur, qui contiennent  $\psi_\alpha^2$ , sont nuls. Par ailleurs,  $\psi_\alpha a_\alpha^+$  commute avec  $\psi_\beta a_\beta^+$ .

**Proposition 4.2.**  $a_\alpha |\psi\rangle = \psi_\alpha |\psi\rangle$ .

*Démonstration :*

$$a_\alpha |\psi\rangle = \prod_{\beta \neq \alpha} (1 - \psi_\beta a_\beta^+) a_\alpha (1 - \psi_\alpha a_\alpha^+) |0\rangle$$

car  $a_\alpha$  commute avec  $\psi_\beta a_\beta^+$ . Mais

$$\begin{aligned} a_\alpha (1 - \psi_\alpha a_\alpha^+) |0\rangle &= \underbrace{a_\alpha |0\rangle}_{=0} + \psi_\alpha a_\alpha a_\alpha^+ |0\rangle \\ &= \psi_\alpha (-a_\alpha^+ a_\alpha + 1) |0\rangle = \psi_\alpha |0\rangle \\ &= \psi_\alpha (1 - \psi_\alpha a_\alpha^+) |0\rangle \quad \text{puisque } \psi_\alpha^2 = 0. \\ \Rightarrow \quad a_\alpha |\psi\rangle &= \psi_\alpha |\psi\rangle \end{aligned}$$

c.q.f.d.

De même  $\langle \psi | = \langle 0 | e^{-\sum_\alpha a_\alpha \bar{\psi}_\alpha} = \langle 0 | e^{\sum_\alpha \bar{\psi}_\alpha a_\alpha}$  est un bra propre de  $a_\alpha^+$  :  $\langle \psi | a_\alpha^+ = \langle \psi | \bar{\psi}_\alpha$ .

### Produit scalaire

Considérons deux états cohérents construits à partir de deux algèbres  $g$  et  $g'$  de générateurs  $\psi_\alpha$  et  $\psi'_\alpha$ .

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi' \rangle &= \langle 0 | \prod_\alpha (1 + \bar{\psi}_\alpha a_\alpha) (1 - \psi'_\alpha a_\alpha^+) |0\rangle \\ &= \langle 0 | \prod_\alpha (1 + \bar{\psi}_\alpha \psi'_\alpha a_\alpha a_\alpha^+) |0\rangle \\ &= \langle 0 | \prod_\alpha (1 + \psi_\alpha \psi'_\alpha (1 - a_\alpha^+ a_\alpha)) |0\rangle \\ &= \prod_\alpha (1 + \bar{\psi}_\alpha \psi'_\alpha) = e^{\sum_\alpha \bar{\psi}_\alpha \psi'_\alpha}. \end{aligned}$$

### Relation de fermeture

$$\int \prod_\alpha d\bar{\psi}_\alpha d\psi_\alpha e^{-\sum_\alpha \bar{\psi}_\alpha \psi_\alpha} |\psi\rangle \langle \psi| = 1.$$

*Démonstration:* Appelons  $A$  cet opérateur. On se propose de démontrer que

$$\langle \alpha_1 \dots \alpha_n | A | \beta_1 \dots \beta_m \rangle = \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \beta_1 \dots \beta_m \rangle$$

où on a introduit les bras et kets propres de l'espace de Fock définis par:

$$|\beta_1 \dots \beta_m\rangle = a_{\beta_1}^+ \dots a_{\beta_m}^+ |0\rangle, \quad \langle \alpha_1 \dots \alpha_n| = \langle 0| a_{\alpha_n} \dots a_{\alpha_1}.$$

Les produits scalaires de ces états avec les états cohérents sont donnés par:

$$\langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \psi \rangle = \langle 0 | a_{\alpha_n} \dots a_{\alpha_1} | \psi \rangle = \psi_{\alpha_n} \dots \psi_{\alpha_1}$$

et

$$\langle \psi | \beta_1 \dots \beta_m \rangle = \bar{\psi}_{\beta_1} \dots \bar{\psi}_{\beta_m}.$$

Ainsi,

$$\langle \alpha_1 \dots \alpha_n | A | \beta_1 \dots \beta_m \rangle = \int \prod_{\alpha} d\bar{\psi}_{\alpha} d\psi_{\alpha} \prod_{\alpha} (1 - \bar{\psi}_{\alpha} \psi_{\alpha}) \psi_{\alpha_n} \dots \psi_{\alpha_1} \bar{\psi}_{\beta_1} \dots \bar{\psi}_{\beta_m}.$$

Pour un état  $\gamma$  donné, les intégrales qui peuvent intervenir sont

$$\int d\bar{\psi}_{\gamma} d\psi_{\gamma} (1 - \bar{\psi}_{\gamma} \psi_{\gamma}) \cdot \begin{Bmatrix} \psi_{\gamma} \bar{\psi}_{\gamma} \\ \bar{\psi}_{\gamma} \\ \psi_{\gamma} \\ 1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix}.$$

Pour que le résultat soit non nul, il faut que chaque état  $\gamma$  soit vide ou occupé simultanément pour les  $\alpha_1 \dots \alpha_n$  et  $\beta_1 \dots \beta_m$ .

$$\Rightarrow \quad \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | A | \beta_1 \dots \beta_m \rangle = \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \beta_1 \dots \beta_m \rangle.$$

### Intégrale gaussienne

$$\begin{aligned} I(\eta, \bar{\eta}) &= \int \prod_{i=1}^n d\bar{\psi}_i d\psi_i e^{-\sum_{i,j} \bar{\psi}_i H_{ij} \psi_j + \sum_i \bar{\eta}_i \psi_i + \sum_i \bar{\psi}_i \eta_i} \\ &= \det H e^{\sum_{i,j} \bar{\eta}_i H_{ij}^{-1} \eta_j}. \end{aligned}$$

*Démonstration :*

$$e^{-\sum_{i,j} \bar{\psi}_i H_{ij} \psi_j} = \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{\left( -\sum_{i,j} \bar{\psi}_i H_{ij} \psi_j \right)^m}{m!}.$$

Dans l'intégrale, seuls les termes contenant  $\bar{\psi}_1 \psi_1 \dots \bar{\psi}_n \psi_n$  donnent une contribution non nulle. Du coup, seul le terme  $m = n$  donne une contribution non nulle. Par

ailleurs, chaque terme non nul a comme coefficient un terme de  $\det H$ . De plus, chaque terme apparaît  $n!$  fois puisqu'on peut choisir l'un des facteurs  $H_{ij}$  parmi  $n$  facteurs, le suivant parmi  $(n-1)$  facteurs, et ainsi de suite. Enfin, on peut s'assurer que chaque terme est affecté du signe qu'il aurait dans le déterminant

$$\Rightarrow I(0,0) = \det H.$$

*Exemple :*

$$\int d\bar{\psi} d\psi e^{-\bar{\psi}a\psi} = \int d\bar{\psi} d\psi (1 - \bar{\psi}a\psi) = a.$$

c.q.f.d.

Le calcul de  $I(\bar{\eta}, \eta)$  se fait par la méthode habituelle après le changement de variables  $\phi_i = \psi_i - H_{ij}^{-1} \eta_j$ .

### Trace d'un opérateur

$$\langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \psi \rangle = \psi_{\alpha_n} \dots \psi_{\alpha_1} \text{ et } \langle \psi | \beta_1 \dots \beta_m \rangle = \bar{\psi}_{\beta_1} \dots \bar{\psi}_{\beta_m}$$

$$\Rightarrow \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \psi \rangle \langle \psi | \beta_1 \dots \beta_m \rangle = \langle \psi | \beta_1 \dots \beta_m \rangle \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \psi \rangle (-1)^{mn}$$

car les variables de Grassman anticommulent. Si  $m$  et  $n$  ont la même parité,  $(-1)^{mn} = (-1)^m$ , et on a :

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \psi \rangle \langle \psi | \beta_1 \dots \beta_m \rangle &= (-1)^m \langle \psi | \beta_1 \dots \beta_m \rangle \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \psi \rangle \\ &= \langle -\psi | \beta_1 \dots \beta_m \rangle \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Du coup, si  $A$  est un opérateur qui conserve la parité du nombre de particules, on a :

$$\begin{aligned} \text{Tr } A &= \sum_n \langle n | A | n \rangle \\ &= \int \prod_{\alpha} d\bar{\psi}_{\alpha} d\psi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \bar{\psi}_{\alpha} \psi_{\alpha}} \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | A | n \rangle \\ &= \int \prod_{\alpha} d\bar{\psi}_{\alpha} d\psi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \bar{\psi}_{\alpha} \psi_{\alpha}} \langle -\psi | A \underbrace{\sum_n | n \rangle \langle n |}_{=1} \psi \rangle \end{aligned}$$

$$\boxed{\text{Tr } A = \int \prod_{\alpha} d\bar{\psi}_{\alpha} d\psi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \bar{\psi}_{\alpha} \psi_{\alpha}} \langle -\psi | A | \psi \rangle.}$$

## Fonction de partition

Cette formule permet d'écrire la fonction de partition sous la forme :

$$Z = \int \prod_{\alpha} d\bar{\psi}_{\alpha} d\psi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \bar{\psi}_{\alpha} \psi_{\alpha}} \langle -\psi | e^{-\beta H} | \psi \rangle.$$

En utilisant la formule de Trotter, cela se réécrit :

$$Z = \int_{\psi_{\alpha}(\beta) = -\psi_{\alpha}(0)} \mathcal{D}\bar{\psi}_{\alpha} \mathcal{D}\psi_{\alpha} e^{-\int_0^{\beta} d\tau \left( \sum_{\alpha} \bar{\psi}_{\alpha}(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{\alpha}(\tau) + H(\bar{\psi}_{\alpha}, \psi_{\alpha}) \right)}.$$

Avec les notations

$$\mathcal{D}\bar{\psi}_{\alpha} \mathcal{D}\psi_{\alpha} = \begin{cases} \prod_{\alpha, \tau} \frac{d\psi_{\alpha}^+(\tau) d\psi_{\alpha}(\tau)}{2\pi i} & \text{bosons} \\ \prod_{\alpha, \tau} d\bar{\psi}_{\alpha}(\tau) d\psi_{\alpha}(\tau) & \text{fermions} \end{cases}$$

et  $\xi = \begin{cases} 1 & \text{bosons} \\ -1 & \text{fermions} \end{cases}$

on peut écrire

$$Z = \int_{\psi_{\alpha}(\beta) = \xi \psi_{\alpha}(0)} \mathcal{D}\bar{\psi}_{\alpha} \mathcal{D}\psi_{\alpha} e^{-\int_0^{\beta} d\tau \left( \sum_{\alpha} \bar{\psi}_{\alpha}(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{\alpha}(\tau) + H(\bar{\psi}_{\alpha}, \psi_{\alpha}) \right)}$$

où les  $\psi_{\alpha}$  sont des variables complexes pour les bosons et des variables de Grassman pour les fermions.

Comme pour les bosons, cette formulation conduit de façon très économique à la théorie de perturbations. Par contre, si on essaie de faire une approximation de phase stationnaire, le champ correspondant au minimum est en général en dehors de l'espace de Fock physique car il s'exprime dans l'espace de Fock généralisé avec des composantes dans l'algèbre de Grassman. Pour pouvoir faire des approximations de phase stationnaire significatives pour les fermions, il faut utiliser une autre représentation de la fonction de partition en termes d'intégrale de chemin à l'aide de champs auxiliaires. Pour cette nouvelle forme d'intégrale de chemin, la représentation à l'aide des variables de Grassman est encore un outil très utile, même s'il n'est pas indispensable.

## Transformation de Hubbard-Stratonovitch

Considérons un hamiltonien d'électrons en interaction décrit par

$$H = \sum_{\alpha, \beta} t_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma},$$



où  $\alpha, \beta, \dots$  incluent le site et le spin.

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} &= - \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} \underbrace{c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma}}_{\delta_{\beta\gamma} - c_{\gamma} c_{\beta}^{\dagger}} c_{\delta} \\
&= - \sum_{\alpha\beta\delta} V_{\alpha\beta\beta\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\delta} + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} \\
\Rightarrow H &= \sum_{\alpha,\beta} K_{\alpha\beta} \hat{\rho}_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{\rho}_{\alpha\gamma} \hat{\rho}_{\beta\delta}
\end{aligned}$$

avec

$$K_{\alpha\delta} = t_{\alpha\delta} - \frac{1}{2} \sum_{\beta} V_{\alpha\beta\beta\delta} \quad \text{et} \quad \hat{\rho}_{\alpha\gamma} = c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma}.$$

Le point de départ de la transformation de Hubbard-Stratanovitch est l'identité gaussienne

$$\int \prod_i dx_i e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} x_i A_{ij} x_j + \sum_i j_i x_i} = \frac{(2\pi)^{N/2}}{\sqrt{\det A}} e^{\frac{1}{2} \sum_{i,j} j_i A_{ij}^{-1} j_j}.$$

Si on fait le changement de variables  $\tilde{x}_i = \sum_j A_{ij} x_j$ , on a :

$${}^t x A x = {}^t \tilde{x} A^{-1} \tilde{x}$$

$$\Rightarrow \int \prod_i d\tilde{x}_i e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} \tilde{x}_i A_{ij}^{-1} \tilde{x}_j + \sum_{i,j} j_i A_{ij}^{-1} \tilde{x}_j} = (2\pi)^{N/2} \sqrt{\det A} e^{\frac{1}{2} \sum_{i,j} j_i A_{ij}^{-1} j_j}.$$

La fonction de partition du hamiltonien précédent s'écrit :

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\alpha} \mathcal{D}\psi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha\beta} \int_0^{\beta} d\tau \bar{\psi}_{\alpha} \left( \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial \tau} + K_{\alpha\beta} \right) \psi_{\beta} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int_0^{\beta} d\tau \bar{\psi}_{\alpha} \psi_{\gamma} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{\psi}_{\beta} \psi_{\delta}}.$$

Appliquons l'identité gaussienne au dernier terme avec

$$A_{ij}^{-1} = -V_{mn}, \quad \tilde{x}_i = \sigma_i, \quad j_i = \rho_m, \quad m = (\alpha, \beta), \quad \rho_{\alpha\gamma} = \bar{\psi}_{\alpha} \psi_{\gamma}.$$

C'est légitime puisque les variables  $\rho_m$  commutent. Ainsi,

$$e^{-\frac{1}{2} \sum_{m,n} \rho_m V_{mn} \rho_n} = \sqrt{\det V} \int \prod_m \frac{d\sigma_m}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{1}{2} \sum_{m,n} \sigma_m V_{mn} \sigma_n - \sum_{m,n} \sigma_m V_{mn} \rho_n}.$$

La fonction de partition s'écrit :

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\alpha} \mathcal{D}\psi_{\alpha} \mathcal{D}\sigma e^{\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int_0^{\beta} d\tau \sigma_{\alpha\gamma} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\beta\delta} - \sum_{\alpha\gamma} \int_0^{\beta} d\tau \bar{\psi}_{\alpha} \left( \delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial}{\partial \tau} + K_{\alpha\gamma} + \frac{1}{2} \sum_{\beta\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\beta\delta} \right) \psi_{\gamma}},$$

où le préfacteur  $\frac{\sqrt{\det V}}{(2\pi)^{N/2}}$  est inclus dans la définition de la mesure  $\mathcal{D}\sigma$ .

On peut maintenant faire l'intégration sur les variables de Grassman :

$$Z = \int \mathcal{D}\sigma \det \left( \frac{\partial}{\partial \tau} + K_{\alpha\gamma} + \frac{1}{2} \sum_{\beta\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\beta\delta} \right) e^{\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int_0^\beta d\tau \sigma_{\alpha\gamma} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\beta\delta}}.$$

C'est une nouvelle forme d'intégrale de chemin. Il faut faire les remarques suivantes :

1. Les  $\sigma(\tau)$  sont des fonctions qui ne sont même pas continues car il n'y a pas de terme cinétique.
2. On peut faire une approximation de phase stationnaire. Le résultat a un sens physique. Comme on peut néanmoins faire plusieurs découplages de l'hamiltonien en un terme quadratique et un terme biquadratique, on peut obtenir différentes approximations.

Exemple  $c_i^+ c_j^+ c_l c_k = -\delta_{jk} c_i^+ c_l + c_i^+ c_k c_j^+ c_l$  (voir plus haut) peut aussi être décomposé comme :

$$c_i^+ (\delta_{jl} - c_l c_j^+) c_k = \delta_{jl} c_i^+ c_k - c_i^+ c_l c_j^+ c_k,$$

ce qui conduit à l'hamiltonien

$$\sum_{\alpha\beta} \tilde{K}_{\alpha\beta} c_\alpha^+ c_\beta - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_\alpha^+ c_\delta c_\beta^+ c_\gamma,$$

avec

$$\tilde{K}_{\alpha\beta} = t_{\alpha\delta} + \frac{1}{2} \sum_{\beta} V_{\alpha\beta\gamma\delta}.$$

On peut démontrer que le premier découplage correspond à l'approximation de Hartree, le deuxième à l'approximation de Hartree-Fock.

3. Cette représentation et un certain nombre de variantes, notamment en termes de variables auxiliaires de type Ising, sont à la base de simulations numériques de type Monte Carlo Quantique.

## Chapitre 5

# Intégrale de chemin et théorie quantique des champs

L'application de la méthode des intégrales de chemin à la théorie quantique des champs est une extension directe de la reformulation de la mécanique quantique par Feynman. Etant donné un lagrangien décrivant un champ, la quantification dite canonique consiste à identifier des champs conjugués et à postuler des relations de commutation entre ces champs conjugués. La méthode des intégrales de chemin consiste à écrire les fonctions de corrélation du champ comme les dérivées d'une fonctionnelle génératrice, et d'écrire cette fonctionnelle génératrice sous la forme d'une intégrale de chemin sur tous les champs classiques à l'aide de l'action classique sous la forme

$$Z = \int \mathcal{D}\varphi e^{\frac{i}{\hbar} S[\varphi]}.$$

L'objet de ce chapitre est de donner une introduction sommaire à cette méthode en explicitant trois aspects :

- L'équivalence de la quantification canonique et de la quantification par l'intégrale de chemin dans le cas du champ de Klein-Gordon.
- L'équivalence avec la formulation en termes d'intégrale de chemin sur les états cohérents dans la limite non relativiste.
- L'utilité, pour ne pas dire la nécessité, de cette formulation dans le cas des théories de jauge.

## 5.1 Champ de Klein-Gordon

La généralisation relativiste de l'équation de Schrödinger d'une particule libre sans spin proposée par Klein et Gordon consiste à partir de  $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$

$$\rightarrow \left( \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \varphi(\vec{r}, t) = \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)^2 \varphi(\vec{r}, t) + m^2 c^2 \varphi(\vec{r}, t),$$

soit, en prenant  $\hbar = c = 1$ , et en définissant le d'Alembertien par

$$\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2,$$

$$\boxed{(\square + m^2)\varphi(x) = 0} \quad (x = (\vec{r}, t)).$$

C'est l'équation de Klein-Gordon.

Son interprétation en termes de fonction d'onde à une particule est problématique:

1. C'est une équation du second ordre. Du coup, pour connaître le mouvement ultérieur, il ne suffit pas de se donner la valeur de la fonction d'onde à l'instant initial, mais il faut aussi se donner la valeur de sa dérivée. Une particule relativiste aurait donc plus de degrés de liberté qu'une particule non relativiste. On peut montrer que cela correspond à la charge de la particule.
2. Comme l'énergie n'est fixée que par la relation  $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ , il y a des solutions d'énergies positives et négatives données par:  $E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ . Les solutions d'énergie négative doivent être interprétées comme des anti-particules.
3. L'équivalent de la densité en mécanique quantique non relativiste,

$$\int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t),$$

ne satisfait pas d'équation de conservation. La quantité

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2mc} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right),$$

qui satisfait l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

avec

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} \left( \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right),$$

n'est pas toujours positive:  $e\rho(\vec{r}, t)$  doit être interprété comme la densité de charge.

En mécanique quantique relativiste, on doit l'interpréter en supposant que  $\varphi(x)$  est un champ. Cette équation est une équation de propagation pour un champ classique. Pour quantifier cette théorie, on peut procéder de deux façons.

### Quantification canonique

Cette équation peut être dérivée d'un principe de moindre action. Considérons en effet l'action :

$$S = \int d^4x \mathcal{L}[\varphi(x), \partial_\mu \varphi(x)] \quad \left\{ \begin{array}{l} \partial_\mu = (\partial_0, \vec{\nabla}) \\ \partial^\mu = (\partial_0, -\vec{\nabla}) \end{array} \right.$$

avec

$$\mathcal{L}[\varphi, \partial_\mu \varphi] = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 - (\vec{\nabla} \varphi)^2 - m^2 \varphi^2 \right].$$

$\mathcal{L}$  est la densité lagrangienne.

Cette action est stationnaire si

$$\frac{\delta S[\varphi]}{\delta \varphi(x_0)} = 0.$$

Mais

$$\frac{\delta S[\varphi]}{\delta \varphi(x_0)} = -\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} + \Delta \varphi - m^2 \varphi.$$

c.q.f.d.

Le champ conjugué de  $\varphi$  est défini par

$$\Pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \varphi)} = \frac{\partial \varphi}{\partial t}(x).$$

La densité hamiltonienne est la transformée de Legendre de  $\mathcal{L}$  :

$$\mathcal{H} = \Pi \partial_0 \varphi - \mathcal{L},$$

soit

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \Pi^2 + \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \varphi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \varphi^2.$$

La théorie est quantifiée en supposant que les champs  $\varphi$  et  $\Pi$  sont des opérateurs qui satisfont les règles de commutation :

$$\left\{ \begin{array}{l} [\varphi(\vec{r}t), \Pi(\vec{r}', t)] = i\delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ [\varphi(\vec{r}t), \varphi(\vec{r}', t)] = 0 \\ [\Pi(\vec{r}t), \Pi(\vec{r}', t)] = 0. \end{array} \right.$$

On passe en transformée de Fourier :

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega_{\vec{k}}}} \left[ a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega_{\vec{k}}t} + a_{\vec{k}}^{\dagger} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r} + i\omega_{\vec{k}}t} \right]$$

avec  $\omega_{\vec{k}} = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$ .

- $[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^{\dagger}] = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}')$
- $[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}] = [a_{\vec{k}}^{\dagger}, a_{\vec{k}'}^{\dagger}] = 0$

$$H \equiv \int \mathcal{H} dx = \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \left( a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \right)$$

$H =$  somme d'oscillateurs harmoniques.

Les fonctions de corrélation du champ  $\varphi(\vec{r}, t)$  s'obtiennent à partir de cette décomposition de Fourier.

### Quantification par l'intégrale de chemin

Le postulat de cette façon de quantifier est le suivant : les fonctions de corrélation du champ dans le vide sont données par la fonctionnelle génératrice

$$Z[j] = \int \mathcal{D}\varphi e^{i \int dx [\mathcal{L}(\varphi, \partial_{\mu}\varphi) + j(x)\varphi(x)]}.$$

Noter l'identité formelle avec la fonction de partition de Landau-Ginsburg.

Plus précisément,

$$\langle 0 | T [\varphi(x)\varphi(y)] | 0 \rangle = \frac{(-i)^2}{Z[0]} \frac{\delta^2 Z[j]}{\delta j(x) \delta j(y)} \Big|_{j=0}.$$

et des formules équivalentes pour les fonctions à  $N$  points.

On peut démontrer explicitement pour le champ libre que cette expression est équivalente à celle obtenue par la quantification canonique.

Étapes du calcul :

1. Intégration par parties pour les dérivées temporelle et spatiales  $\rightarrow$  intégrale gaussienne en  $\varphi$ .
2. Calcul de l'intégrale gaussienne.
3. Calcul de la dérivée seconde.

## 5.2 Limite non relativiste

Pour prendre la limite non relativiste, on fait un changement de variables, et on définit :

$$\begin{cases} \psi(\vec{r}, t) = e^{imt} \left[ \sqrt{\frac{m}{2}} \varphi(\vec{r}, t) + \frac{i}{\sqrt{2m}} \Pi(\vec{r}, t) \right] \\ \psi^+(\vec{r}, t) = e^{-imt} \left[ \sqrt{\frac{m}{2}} \varphi(\vec{r}, t) - \frac{i}{\sqrt{2m}} \Pi(\vec{r}, t) \right]. \end{cases}$$

On vérifie aisément que

$$\begin{aligned} [\psi(\vec{r}, t), \psi^+(\vec{r}', t)] &= \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \\ [\psi(\vec{r}, t), \psi(\vec{r}', t)] &= [\psi^+(\vec{r}, t), \psi^+(\vec{r}', t)] = 0. \end{aligned}$$

Cette transformation s'inverse en :

$$\begin{cases} \varphi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2m}} [\psi(\vec{r}, t)e^{-imt} + \psi^+(\vec{r}, t)e^{imt}] \\ \Pi(\vec{r}, t) = -i\sqrt{\frac{m}{2}} [\psi(\vec{r}, t)e^{-imt} - \psi^+(\vec{r}, t)e^{imt}]. \end{cases}$$

La densité lagrangienne

$$\mathcal{L} = \Pi \partial_0 \varphi - \mathcal{H}$$

s'écrit :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[ \psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^+}{\partial t} \psi \right] - \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} \psi^+) (\vec{\nabla} \psi) + e^{2imt} [ ] + e^{-2imt} [ ].$$

La limite non relativiste s'obtient en supposant que  $\psi(\vec{r}, t)$  et  $\psi^+(\vec{r}, t)$  varient lentement par rapport à  $e^{\pm 2imt}$ . En effet, pour une particule non relativiste, la fonction d'onde  $\varphi(\vec{r}, t)$  doit varier comme  $e^{-imt}$  que multiplie une fonction qui varie lentement avec le temps. Ainsi,  $\psi(\vec{r}, t)$  et  $\psi^+(\vec{r}, t)$  contiennent une composante qui varie lentement avec le temps. Du coup, on peut négliger ces termes dans l'intégrale de chemin. Après une intégration par parties, il vient :

$$Z = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* \exp \left\{ i \int dt \int d\vec{r} \psi^* i \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi^+ \left( \frac{-\vec{\nabla}^2}{2m} \right) \psi + \text{termes de source} \right\}.$$

Cette fois, on a une dérivée première par rapport à  $t$ . Cette expression est la même que celle qu'on obtiendrait pour des bosons libres à l'aide d'opérateurs champ. Inversement, on pourrait retrouver l'intégrale de chemin en termes d'états cohérents en passant en transformée de Fourier et en utilisant une formulation généralisée avec une intégrale sur  $\mathcal{D}\Pi$ .

### 5.3 Intégrale de chemin et théories de jauge

De même que la quantification par l'intégrale de chemin est beaucoup plus directe pour obtenir les fonctions de corrélation que la quantification canonique, c'est une méthode très puissante dans le contexte des théories de jauge. Ceci dit, la présence d'un degré de liberté de jauge crée une difficulté supplémentaire. En quantification canonique, il y a des moments conjugués qui s'annulent. Considérons par exemple le lagrangien du champ électromagnétique

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} - j^\mu A_\mu,$$

avec

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu = -F^{\nu\mu}$$

$$(j^\mu = (j^0, j^i), \quad j_\mu = (j^0, -j_i), \quad \partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} \dots).$$

Il ne contient pas la dérivée par rapport au temps de  $A^0 = \varphi$  (potentiel scalaire)  $\Rightarrow \Pi^0 = 0$ .

Si l'on continue dans cette voie,  $A_0$  commute avec toutes les composantes  $\Pi_i \Rightarrow$  c'est un nombre. On a donc perdu la covariance manifeste de la théorie.

Dans la quantification par l'intégrale de chemin, on pourrait être tenté d'écrire simplement la fonctionnelle génératrice

$$Z[j] = \int \mathcal{D}A_\mu \exp \left[ i \int d^4x \mathcal{L}_0(A_\mu) - j^\mu A_\mu \right],$$

où  $\mathcal{L}_0(A_\mu)$  peut s'écrire, après une intégration par partie,

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2}A^\mu \left[ \square g_{\mu\nu} - \partial_\mu \partial_\nu \right] A^\nu.$$

Cette intégrale a l'air d'une intégrale gaussienne. Malheureusement, l'opérateur  $\square g_{\mu\nu} - \partial_\mu \partial_\nu$  n'a pas d'inverse. Il donne 0 si on l'applique à un champ du type  $\partial^\nu \Lambda$ , où  $\Lambda$  est une fonction quelconque de  $x$ . Pour pouvoir utiliser la quantification par l'intégrale de chemin, il faut fixer la jauge, ou plus exactement intégrer sur les classes d'équivalence de configurations de  $A$ . En pratique, cela conduit à un lagrangien modifié pour le champ électromagnétique

$$\mathcal{L}_0 \rightarrow \mathcal{L}_S = \frac{1}{2}A^\mu \left[ \square g_{\mu\nu} - \partial_\mu \partial_\nu \right] A^\nu - \frac{1}{2a}(\partial_\mu A^\mu)^2, \quad (5.1)$$

où  $\mathcal{L}_S$  est le lagrangien de Stückelberg,  $a$  est un paramètre et  $\partial_\mu A^\mu$  est un terme fixant la jauge. On peut vérifier que les quantités physiques sont indépendantes de  $a$ , et que les résultats sont les mêmes que ceux obtenus par la quantification canonique.



Dans le cas de la chromodynamique quantique, où l'on est confronté à des théories de jauge non abéliennes, cela impose d'introduire des champs fermioniques fictifs appelés "fantômes de Fadeev-Popov".



# Chapitre 6

## Appendices mathématiques

### A Intégrales gaussiennes

1.  $Z(j) = \int dx e^{-\frac{1}{2}Ax^2+jx}, \quad Z(0) = \int dx e^{-\frac{1}{2}Ax^2}$

Calcul de  $Z(0)$  :

$$\begin{aligned} Z(0)^2 &= \int dx \int dy e^{-\frac{1}{2}A(x^2+y^2)} \\ &= 2\pi \int_0^{+\infty} r dr e^{-\frac{1}{2}Ar^2} \\ &= 2\pi \int_0^{+\infty} du e^{-Au} \\ &= 2\pi \left[ \frac{e^{-Au}}{-A} \right]_0^{+\infty} \\ &= \frac{2\pi}{A} \\ \Rightarrow \quad &\boxed{Z(0) = \sqrt{\frac{2\pi}{A}}} \end{aligned}$$

Calcul de  $Z(j)$  :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}Ax^2 + jx &= -\frac{1}{2}A \left( x^2 - \frac{2j}{A}x \right) \\ &= -\frac{1}{2}A \underbrace{\left( x - \frac{j}{A} \right)^2}_{x'} + \frac{1}{2}A \frac{j^2}{A^2} \end{aligned}$$

$$Z(j) = \int dx' e^{-\frac{1}{2}Ax'^2} e^{\frac{1}{2}j^2/A} = e^{\frac{j^2}{2A}} Z(0).$$

2.  **$N$  variables** : Soit  $A$  une matrice symétrique définie positive, et considérons l'expression

$$Z(j) = \int \prod_{i=1}^N dx_i \exp \left( -\frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i,j=1}^N x_i A_{ij} x_j}_{{}^t x A x} + \underbrace{\sum_{r=1}^N j_r x_r}_{{}^t j x} \right).$$

On effectue le changement de variables  $x = x' + A^{-1}j$ . Comme  ${}^t x = {}^t x' + {}^t j {}^t A^{-1}$ , on en déduit aisément :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} {}^t x A x + {}^t j x &= -\frac{1}{2} {}^t x' A x' + \frac{1}{2} {}^t j A^{-1} j \\ \Rightarrow Z(j) &= Z(0) e^{\frac{1}{2} {}^t j A^{-1} j} \\ \text{avec } Z(0) &= \int \prod_{i=1}^N dx_i \exp \left( -\frac{1}{2} {}^t x A x \right). \end{aligned}$$

$A$  est symétrique donc diagonalisable. Soit  $R$  la transformation orthogonale ( $R {}^t R = \mathbb{1}$ ) qui la diagonalise

$$A = {}^t R D R, \quad D = \begin{pmatrix} d_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & d_N \end{pmatrix}, \quad d_i > 0 \ \forall i \ (A > 0).$$

$R$  orthogonale  $\Rightarrow \det R = 1$ .

Si on fait le changement de variables  $x' = R x$ , on a donc :

$$\begin{aligned} \int \prod_{i=1}^N dx_i \exp \left( -\frac{1}{2} {}^t x A x \right) &= \int \prod_{i=1}^N dx'_i \exp \left( -\frac{1}{2} {}^t x' D x' \right) \\ &= \int \prod_{i=1}^N dx'_i \exp \left( -\frac{1}{2} d_i x'^2_i \right) = \prod_{i=1}^N \sqrt{\frac{2\pi}{d_i}} \\ &= (2\pi)^{N/2} \left( \prod_i d_i \right)^{-1/2} = (2\pi)^{N/2} \frac{1}{\sqrt{\det A}} \end{aligned}$$

$$\text{Ainsi, } Z(j) = \frac{(2\pi)^{N/2}}{\sqrt{\det A}} e^{\frac{1}{2} {}^t j A^{-1} j} \quad (0.1)$$

## B Intégrales gaussiennes et variables complexes

$$1. \int \frac{dz dz^*}{2\pi i} e^{-z^* H z + J^* z + J z^*} \equiv I(J), H \in \mathbb{R}^+$$

$$\begin{aligned} I(0) &= \int \frac{d(\operatorname{Re} z) d(\operatorname{Im} z)}{\pi} e^{-H|z|^2} \\ &= \int \frac{r dr d\theta}{\pi} e^{-Hr^2} = \int 2r dr e^{-Hr^2} \\ &= \int_0^{+\infty} du e^{-Hu} = \left[ \frac{e^{-Hu}}{-H} \right]_0^{+\infty} = \frac{1}{H} \end{aligned}$$

$$y = z - \frac{J}{H} \Rightarrow z = y + \frac{J}{H}$$

$$\begin{aligned} -z^* H z + J^* z + J z^* &= -\left(y^* + \frac{J^*}{H}\right) H \left(y + \frac{J}{H}\right) + J^* \left(y + \frac{J}{H}\right) + J \left(y^* + \frac{J^*}{H}\right) \\ &= -y^* H y - y^* J - J^* y - \frac{|J|^2}{H} + J^* y + J y^* + \frac{|J|^2}{H} + \frac{|J|^2}{H} \\ &= -y^* H y + \frac{|J|^2}{H} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{I(J) = \frac{1}{H} e^{|J|^2/H}}.$$

$$2. I(j) = \int \prod_{i=1}^N \frac{dz_i^* dz_i}{2\pi i} e^{-z^+ H z + J^+ z + z^+ J}, H \text{ hermitien positif, } z \text{ et } J \text{ vecteurs.}$$

$$I(0) = \int \prod_{i=1}^N \frac{dz_i^* dz_i}{2\pi i} e^{-z^+ H z}.$$

$H$  hermitien  $\Rightarrow$  il est diagonalisable par une transformation unitaire  $R^+ R = \mathbb{1}$  telle que  $H = R^+ D R$ .

Le jacobien de la transformation associée vaut 1. En effet,  $y = R z$ . Posons  $y = y_1 + i y_2$ ,  $z = z_1 + i z_2$ ,  $R = R_1 + i R_2$ .

$$\begin{aligned} R \text{ unitaire} &\Rightarrow R R^+ = \mathbb{1} \\ (R_1 + i R_2)^t (R_1 - i R_2) &= \mathbb{1} \\ \Rightarrow &\begin{cases} R_1^t R_1 + R_2^t R_2 = \mathbb{1} \\ R_2^t R_1 - R_1^t R_2 = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Posons  $Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$ ,  $Z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}$

$$y = Rz \Leftrightarrow \begin{cases} y_1 = R_1 z_1 - R_2 z_2 \\ y_2 = R_2 z_1 + R_1 z_2 \end{cases}$$

soit

$$Y = \begin{pmatrix} R_1 & -R_2 \\ R_2 & R_1 \end{pmatrix} Z.$$

Démontrons que la matrice

$$X = \begin{pmatrix} R_1 & -R_2 \\ R_2 & R_1 \end{pmatrix}$$

est orthogonale.

$$\begin{aligned} X^t X &= \begin{pmatrix} R_1 & -R_2 \\ R_2 & R_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {}^t R_1 & {}^t R_2 \\ -{}^t R_2 & {}^t R_1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} R_1 {}^t R_1 + R_2 {}^t R_2 & R_1 {}^t R_2 - R_2 {}^t R_1 \\ R_2 {}^t R_1 - R_1 {}^t R_2 & R_2 {}^t R_2 + R_1 {}^t R_1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

c.q.f.d

Si on fait le changement de variable  $z \rightarrow y$  dans l'intégrale, le jacobien est égal à 1, et il vient :

$$\begin{aligned} I(0) &= \int \prod_{i=1}^N \frac{dy_i dy_i^*}{2i\pi} e^{-d_i |y_i|^2} = \prod_i \frac{1}{d_i} \\ &\Rightarrow \boxed{I(0) = (\det H)^{-1}}. \end{aligned}$$

Enfin, si  $J \neq 0$ , on commence par le changement de variables

$$y = z - H^{-1}J \quad \Rightarrow \quad z = y + H^{-1}J$$

$$\begin{aligned} -z^+ H z + J^+ z + z^+ J &= -(y^+ + J^+ H^{-1}) H (y + H^{-1}J) + J^+ (y + H^{-1}J) + (y^+ + J^+ H^{-1}) J \\ &= -y^+ H y + J^+ H^{-1} J \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{I(J) = \frac{e^{\sum_{i,j} J_i^* H_{ij}^{-1} J_j}}{\det H}}.$$

Remarque: Cette identité reste vraie même si  $H$  n'est pas hermitien (démonstration non donnée), la seule condition étant la positivité de sa partie hermitienne pour assurer la convergence de l'intégrale.

## C Approximation de la phase stationnaire

Considérons l'intégrale

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\lambda f(t)}$$

et supposons que  $f'(t_0) = 0$ . La contribution à cette intégrale venant des points proches de  $t_0$  peut être obtenue en développant  $f(t)$  autour de  $t_0$  :

$$f(t) = f(t_0) + \frac{(t - t_0)^2}{2} f''(t_0) + O((t - t_0)^3).$$

Si on ne retient que les termes d'ordre 2, on trouve

$$I \simeq e^{i\lambda f(t_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\lambda f''(t_0) \frac{(t-t_0)^2}{2}}.$$

Il s'agit d'une intégrale gaussienne, et elle vaut  $\sqrt{\frac{2\pi}{-i\lambda f''(t_0)}}$

$$\Rightarrow \boxed{I = \sqrt{\frac{2i\pi}{\lambda f''(t_0)}} e^{i\lambda f(t_0)}}.$$

C'est l'approximation de la phase stationnaire. Dans quelle mesure s'agit-il d'une bonne approximation ? On peut démontrer que l'intégrale  $I$  considérée comme fonction de  $\lambda$  possède un développement en série en puissances de  $\frac{1}{\lambda}$ , i.e.

$$I(\lambda) = \sqrt{\frac{2i\pi}{\lambda f''(t_0)}} e^{i\lambda f(t_0)} \left( 1 + \frac{a_1}{\lambda} + \frac{a_2}{\lambda^2} + \dots \right).$$

Par conséquent, le terme qu'on a calculé domine dans la limite  $\lambda \rightarrow +\infty$ . Malheureusement, cette série n'est pas convergente. elle est simplement asymptotique. Posons en effet

$$I(\lambda) = \sqrt{\frac{2i\pi}{\lambda f''(t_0)}} e^{i\lambda f(t_0)} F(\lambda)$$

et écrivons le développement de  $F(\lambda)$  sous la forme :

$$F(\lambda) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{a_n}{\lambda^n} \quad (a_0 = 1).$$

Alors

$$\left| F(\lambda) - \sum_{n=0}^N \frac{a_n}{\lambda^n} \right| = o\left(\frac{1}{\lambda^N}\right).$$

Par contre, le rayon de convergence de la série (en  $\frac{1}{\lambda}$ ) est égal à 0.

La propriété fondamentale des développements asymptotiques est que les premiers termes donnent une approximation très précise si  $\lambda$  est petit.

Le même type d'idée peut être utilisé pour une intégrale du type

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\lambda f(t)}.$$

La contribution dominante vient du point où  $f$  est minimum

$$\begin{cases} f'(t_0) &= 0 \\ f''(t_0) &> 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \boxed{I(\lambda) \simeq \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda f''(t_0)}} e^{-\lambda f(t_0)}}.$$

Dans ce cas on parle de méthode du col (ou de Laplace). Les propriétés de convergence sont plus faciles à établir dans ce cas.

## D Eléments de calcul fonctionnel

Une fonctionnelle est une fonction de l'espace des fonctions vers  $\mathbb{R}$  (ou  $\mathbb{C}$ )

$$\begin{aligned} F : \{f\} &\rightarrow \mathbb{R} \\ f &\mapsto F[f]. \end{aligned}$$

Autrement dit, une fonctionnelle associe un nombre à une fonction donnée.

*Exemple:*  $S[x] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(x, \dot{x}, t)$  est un fonctionnelle.

Le concept de dérivée peut être étendu aux fonctionnelles, mais il s'agit d'une généralisation non triviale.

**Dérivée de Gâteaux :** la dérivée de Gâteaux de  $F$  dans la direction  $v$  est une fonctionnelle définie par :

$$D_v F[f] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f + \epsilon v] - F[f]}{\epsilon}$$

où  $v$  est une fonction.



Exemples :

- $F[f] = f(x_1) \dots f(x_n)$

$$D_v F[f] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{[f(x_1) + \epsilon v(x_1)] \dots [f(x_n) + \epsilon v(x_n)] - f(x_1) \dots f(x_n)}{\epsilon}.$$

Pour prendre la limite, il suffit de garder les termes linéaires en  $\epsilon$

$$\begin{aligned} D_v F[f] &= v(x_1) f(x_2) \dots f(x_n) + f(x_1) v(x_2) \dots f(x_n) + \\ &\quad \dots + f(x_1) \dots f(x_{n-1}) v(x_n). \end{aligned}$$

- $F[f] = V(f(x))$

$$D_v F[f] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{V(f(x) + \epsilon v(x)) - V(f(x))}{\epsilon}.$$

Mais

$$\begin{aligned} V(f(x) + \epsilon v(x)) &= V(f(x)) + \epsilon v(x) V'(f(x)) + O(\epsilon^2) \\ \Rightarrow D_v F[f] &= V'(f(x)) v(x). \end{aligned}$$

- $F[f] = \int dx G(f(x))$

$$D_v F[f] = \int dx G'(f(x)) v(x).$$

- $F[f] = V(f'(x))$

$$D_v F[f] = V'(f'(x)) v'(x).$$

- $F[f] = \int dx G(f'(x))$

$$D_v F[f] = \int dx G'(f'(x)) v'(x).$$

D'après la définition de  $D_v F[f]$ , il est clair que l'application qui à  $v$  associe  $D_v F[f]$  est une forme linéaire sur l'espace des fonctions, donc une distribution

$$D_v F[f] = \int dx v(x) \frac{\delta F[f]}{\delta f(x)}.$$

La *dérivée fonctionnelle* de  $F$  par rapport à  $f$  est la distribution définie par cette équation. En pratique,  $\frac{\delta F[f]}{\delta f(y)}$  s'obtient à partir de  $D_v F[f]$  en remplaçant  $v(x)$  par  $\delta(x - y)$ .

Exemples :

$$\begin{aligned} \bullet \quad F[f] &= V(f(x)) \\ &\Rightarrow \quad \frac{\delta F[f]}{\delta f(y)} = V'(f(x))\delta(x-y). \end{aligned}$$

On vérifie bien sûr que

$$\begin{aligned} \int dy v(y) \frac{\delta F[f]}{\delta f(y)} &= \int dy v(y) V'(f(x))\delta(x-y) \\ &= v(x) V'(f(x)). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bullet \quad F[f] &= \int dx G(f(x)) \quad \Rightarrow \quad \frac{\delta F[f]}{\delta f(y)} = G'(f(y)) \\ \bullet \quad F[f] &= V(f'(x)) \\ &\Rightarrow \quad \frac{\delta F[f]}{\delta f(y)} = V'(f'(x))\delta'(x-y). \end{aligned}$$

Attention !

$$\int dy V'(f'(x))v(y)\delta'(x-y) = V'(f'(x))v'(x)$$

mais

$$\int dx V'(f'(x))\delta'(x-y) = -V''(f'(y))f''(y)$$

car  $\delta'$  est impaire.

$$\begin{aligned} \bullet \quad F[f] &= \int dx G(f'(x)) \\ &\Rightarrow \quad \frac{\delta F[f]}{\delta f(y)} = \int dx G'(f'(x))\delta'(x-y) = -G''(f'(y))f''(y). \end{aligned}$$

## D.1 Propriétés

La dérivée fonctionnelle ainsi définie possède les propriétés habituelles de la dérivée :

$$\begin{aligned} \bullet \quad \frac{\delta}{\delta f(x)} (F_1[f] + F_2[f]) &= \frac{\delta F_1[f]}{\delta f(x)} + \frac{\delta F_2[f]}{\delta f(x)} \\ \bullet \quad \frac{\delta}{\delta f(x)} (F_1[f]F_2[f]) &= \frac{\delta F_1[f]}{\delta f(x)}F_2[f] + F_1[f]\frac{\delta F_2[f]}{\delta f(x)} \end{aligned}$$

## D.2 Dérivées d'ordre supérieur

$D_{v_2} D_{v_1} F[f]$  est bien définie puisque  $D_{v_1} F[f]$  est une fonctionnelle. C'est manifestement une forme bilinéaire en  $v_1$  et  $v_2$ , et elle s'écrit de façon générale

$$D_{v_2} D_{v_1} F[f] = \int dx_1 v_1(x_1) \int dx_2 v_2(x_2) \frac{\delta^2 F[f]}{\delta f(x_1) \delta f(x_2)}$$

où  $\frac{\delta^2 F[f]}{\delta f(x_1) \delta f(x_2)}$  est un produit de distributions par rapport aux variables  $x_1, x_2, \dots$

On définit de même les ordres supérieurs.

## D.3 Développement de Taylor

$$\begin{aligned} F[f + \eta] &= F[f] + \int dx_1 \eta(x_1) \frac{\delta F[f]}{\delta f(x_1)} \\ &\quad + \frac{1}{2} \int dx_1 \eta(x_1) \int dx_2 \eta(x_2) \frac{\delta^2 F[f]}{\delta f(x_1) \delta f(x_2)} + \dots \end{aligned}$$

*Démonstration :* on considère la fonction

$$\begin{aligned} g(t) &\equiv F[f + t\eta] \\ g'(t) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f + (t + \epsilon)\eta] - F[f + t\eta]}{\epsilon} \\ &= D_\eta F[f + t\eta]. \end{aligned}$$

Or, si  $g^{(n)}(t) = \underbrace{D_\eta \dots D_\eta}_{n \text{ fois}} F[f + t\eta]$ , il est évident que

$$g^{(n+1)}(t) = \underbrace{D_\eta \dots D_\eta}_{n+1 \text{ fois}} F[f + t\eta].$$

On en déduit que

$$g(t) = g(0) + t D_\eta F[f] + \frac{t^2}{2!} D_\eta D_\eta F[f] + \dots$$

Pour  $t = 1$ , il vient :

$$F[f + \eta] = F[f] + D_\eta F[f] + \frac{1}{2!} D_\eta D_\eta F[f] + \dots$$

Par définition de la dérivée fonctionnelle,

$$\underbrace{D_\eta \dots D_\eta}_{n \text{ fois}} F[f] = \int dx_1 \eta(x_1) \dots \int dx_n \eta(x_n) \frac{\delta^{(n)} F[f]}{\delta f(x_1) \dots \delta f(x_n)}.$$

## E Transformée de Fourier

Soit  $A_{ij}$  une matrice réelle telle que  $A_{ij} = A(i - j)$  ne dépende que de  $i - j$ . On suppose qu'on a des conditions aux limites périodiques. Alors  $A_{ij}$  est diagonalisée par une transformée de Fourier. Plus précisément, supposons que  $i = 1, \dots, N$ , et considérons la matrice unitaire

$$U_{mn} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i \frac{2\pi m}{N} n}, \quad m, n = 1, \dots, N.$$

Soit

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{mn} &= (UAU^{-1})_{mn} \\ &= \sum_{i,j} U_{mi} A_{ij} U_{jn}^{-1} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{iqi} A_{ij} e^{iq'j} \quad \left\{ \begin{array}{l} q = \frac{2\pi}{N} m \\ q' = \frac{2\pi}{N} n \end{array} \right. \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i(q-q')i} A_{ij} e^{iq'(i-j)} \\ &= \frac{1}{N} \underbrace{\sum_i e^{i(q-q')i}}_{N\delta_{qq'}} \underbrace{\sum_j A(i-j) e^{iq'(i-j)}}_{\text{cette somme est indépendante de } i} \\ &\quad \text{(A invariante par translation et conditions aux limites périodiques).} \end{aligned}$$

*Définitions :* La transformée de Fourier de la fonction  $A(i - j)$  est définie par

$$\tilde{A}(q) = \sum_r A(r) e^{iqr}.$$

La matrice  $\tilde{A} = (UAU^{-1})$  s'appelle la transformée de Fourier de la matrice  $A$ . Si  $A$  est périodique,  $\tilde{A}$  est diagonale et est donnée par:

$$\tilde{A}_{mn} = \delta_{mn} \tilde{A} \left( q = \frac{2\pi}{N} m \right).$$

- La transformée de Fourier inverse s'écrit :

$$\begin{aligned}
 A_{ij} &= \left( U^{-1} \tilde{A} U \right)_{ij} \\
 &= \sum_{mn} U_{im}^{-1} \tilde{A}_{mn} U_{nj} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_m e^{-i \frac{2\pi im}{N}} \tilde{A} \left( q = \frac{2\pi m}{N} \right) e^{i \frac{2\pi mj}{N}} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_q e^{-iq(i-j)} \tilde{A}(q).
 \end{aligned}$$

- Si on passe à la limite continue, on se limite à un intervalle de longueur  $2\pi$ , par exemple  $[-\pi, \pi]$

$$\rightarrow A_{ij} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq e^{-iq(i-j)} \tilde{A}(q).$$

- Si  $A$  est tridimensionnelle, on intègre sur la première zone de Brillouin (ZB) dont le volume est  $(2\pi)^3$

$$\rightarrow A(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{ZB} d\vec{q} e^{-i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \tilde{A}(\vec{q}).$$

- Enfin,  $\widetilde{A^{-1}} = (\tilde{A})^{-1}$ .

En effet,

$$\begin{aligned}
 \widetilde{A^{-1}} &= U A^{-1} U^{-1} \\
 \left( \widetilde{A^{-1}} \right)^{-1} &= U A U^{-1} = \tilde{A} \\
 \Rightarrow \widetilde{A^{-1}} &= \left( \tilde{A} \right)^{-1}.
 \end{aligned}$$

L'ingrédient essentiel est que la matrice de passage est la même pour toutes les matrices invariantes par translation.

- *Conséquence :*

$$\begin{aligned}
 A_{ij}^{-1} &= \frac{1}{N} \sum_q \widetilde{A^{-1}}(q) e^{-iq(i-j)} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_q \left( \tilde{A}(q) \right)^{-1} e^{-iq(i-j)} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_q \frac{e^{-iq(i-j)}}{\tilde{A}(q)}
 \end{aligned}$$